

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

Departamento de Física Aplicada III (Electricidad y Electrónica)



**RUIDO DE ALTA FRECUENCIA GENERADO POR
ELECTRONES CALIENTES EN GAS : TÉCNICAS DE
SIMULACIÓN NUMÉRICA Y CARACTERIZACIÓN
EXPERIMENTAL**

MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR

PRESENTADA POR

José Miguel Miranda Pantoja

Bajo la dirección del doctor

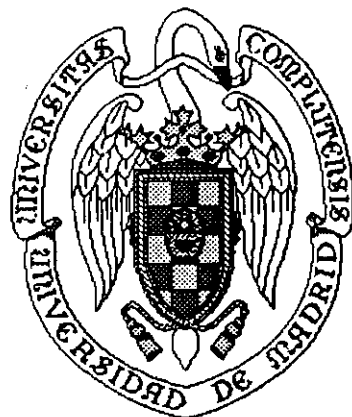
Jose Luis Sebastián Franco

Madrid, 2003

ISBN: 978-84-669-1587-8

©José Miguel Miranda Pantoja, 1998

TI-1997/39



*Ruido de alta frecuencia generado por
electrones calientes en GaAs: técnicas de
simulación numérica y caracterización
experimental*



N.º REGISTRO 23.493

*Tesis doctoral presentada por Jose Miguel Miranda Pantoja
Dirección: Jose Luis Sebastián Franco
Departamento de Física Aplicada III
Facultad de Ciencias Físicas
MADRID, Diciembre 1997*

A Elena, mi esposa

INDICE

<i>Agradecimientos</i>	iii
<i>Planteamiento e interés de la tesis</i>	v
<i>Objetivos y organización</i>	vi

I Descripción del simulador

I.1 Introducción.....	3
I.2 Estructura del simulador.....	4
I.3 Mecanismos de dispersión incluidos.....	6
I.4 Cálculo de la duración de las trayectorias.....	9
I.5 Optimización de la eficiencia.....	12
I.6 Resultados preliminares.....	16
I.7 Conclusiones.....	20

II Técnicas de estimación espectral utilizadas

II.1 Introducción.....	25
II.2 La función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad.....	27
II.3 Cálculo del espectro: integración directa y transformadas rápidas.....	28
II.4 Implementación del Método de Máxima Entropía.....	30
II.5 Comparación entre las distintas técnicas utilizadas.....	33
Ejemplo 1. Espectros de ruido lorentzianos.....	33
Ejemplo 2. Espectros no lorentzianos.....	39
II.6 Resultados de las simulaciones.....	43
Ejemplo 3. Simulaciones a distintas temperaturas.....	43
Ejemplo 4. Coeficientes de difusión y temperatura de ruido.....	46
II.7 Conclusiones.....	53

III Simulación autoconsistente del material degenerado

III.1 Introducción.....	57
III.2 El factor de apantallamiento.....	58
III.3 El método autoconsistente.....	60
III.4 Apantallamiento de fonones.....	62
III.5 La interacción electrón - electrón.....	64

III.6 El Principio de Exclusión de Pauli.....	68
III.7 Resultados de las simulaciones.....	69
Ejemplo 1. Simulaciones a 300 K.....	69
Ejemplo 2. Simulaciones a otras temperaturas.....	76
Ejemplo 3. El gas 3-D.....	78
III.8 Conclusiones.....	81

IV Medidas de ruido a frecuencia de microondas

IV.1 Introducción.....	85
IV.2 Medición del ruido en dispositivos de una puerta.....	86
IV.3 Caracterización de los componentes.....	90
IV.4 Influencia del desacoplo del dispositivo.....	94
IV.5 Diseño y caracterización de las muestras.....	97
IV.6 Estimación de la temperatura física de las muestras.....	101
IV.7 Resultados de las medidas y comparación con las simulaciones.....	105
IV.8 Conclusiones.....	109

V Conclusiones Finales

V.1 Aportaciones más destacadas.....	113
V.2 Futuros desarrollos.....	116

A-I Integración de las probabilidades de dispersión por fonones ópticos polares con apantallamiento en condiciones de no equilibrio y correcciones de no parabolicidad	119
--	-----

A-II NOISEM2: Aplicación para el control del medidor de ruido	129
---	-----

A-III Comunicaciones con otros investigadores	137
---	-----

A-IV MC37: Simulación del ruido en GaAs	143
---	-----

Referencias	153
-------------------	-----

Agradecimientos

Quiero expresar en primer lugar mi gratitud al profesor **Jose Luis Sebastián Franco**. Porque ha puesto su experiencia y su tiempo a mi disposición, y porque su carácter afable y abierto ha propiciado un excelente entorno de trabajo.

Asímismo, quiero agradecer a **Tomás González**, al profesor **Daniel Pardo** y a **Javier Mateos** de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Salamanca los numerosos comentarios y sugerencias relativas a las simulaciones presentadas en esta tesis.

La instalación del sistema experimental y la realización de las medidas han sido parcialmente financiadas por la **Fundación Alemana de la Ciencia** y por la **Comunidad Europea**, a través del programa "Training and Mobility of Researchers".

Las medidas de ruido presentadas en esta tesis han sido posibles gracias al inestimable apoyo y cooperación de numerosos investigadores del **Institut für Hochfrequenztechnik de Darmstadt**. Por ello quiero agradecer al director del Centro, el profesor **Hans Ludwig Hartnagel** la confianza y el interés que ha manifestado en mis trabajos. **Martin Schußler** me ha prestado una valiosa ayuda poniendo a mi disposición su amplia experiencia en la realización de microsoldaduras. **Chih I Lin**, **Mohamed Shaalan** y **Michael Brandt** me han suministrado distintas muestras de GaAs degenerado para los ensayos preliminares y también para las medidas finales aquí presentadas. Asímismo, **Chih I** me ha ayudado haciendo de "beta-tester" en el programa de control del medidor de ruido. Y por supuesto, no puedo dejar de expresar mi gratitud a mi entrañable compañero y amigo, **Rolf Riemenschneider**, por haber hecho mis estancias en Darmstadt tan gratas, y por haberme facilitado informes de actividades sobre distintos proyectos de investigación en curso relacionados con esta tesis.

Deseo expresar mi gratitud a Juan Daniel Gallego, del Centro de Radioastronomía de Yebes, por la ayuda prestada en la fabricación de las primeras monturas para las medidas de ruido.

Mi más sincero agradecimiento a Jorge Sánchez y el profesor Elías Muñoz Merino, de la Escuela Superior de Ingenieros de Telecomunicaciones de la Universidad Politécnica de Madrid, quienes me han proporcionado distintas muestras de GaAs.

Finalmente, quiero transmitir mi gratitud al profesor Walter Ted Masselink, de la Universidad Alexander Von Humboldt de Berlín, quien me ha facilitado importantes aclaraciones relativas a la realización de sus medidas de velocidades en GaAs degenerado; así como a Massimo Fischetti, del centro de investigación Watson de IBM en New York, quien me ha proporcionado inapreciables sugerencias sobre algunos refinamientos a los modelos físicos de los simuladores de Monte Carlo.

Planteamiento e interés de la tesis

El ruido es indudablemente un importante problema en la Ciencia y la Ingeniería. Impone límites insalvables a la precisión de cualquier medida, así como a los niveles mínimos de señal que pueden ser detectados. La investigación del ruido se puede abordar desarrollando técnicas de diseño global de sistemas de comunicación y medida o bien modelizando la física de cada uno de sus constituyentes; la cual puede estudiarse con eficacia mediante métodos de simulación a nivel microscópico.

Esta tesis se ha centrado en el estudio de la modelización y caracterización experimental del ruido. Las simulaciones que aquí se presentan utilizan la técnica más conocida en la investigación de las propiedades físicas de los semiconductores: el método de Monte Carlo. La utilidad del método de Monte Carlo ha sido ampliamente demostrada con innumerables aplicaciones, y su accesibilidad aumenta continuamente gracias al rápido desarrollo que están experimentando los ordenadores de alta velocidad de cálculo.

No es posible abarcar en una simulación a nivel microscópico modelos que sean adecuados para todos los semiconductores, y por ello se ha centrado este trabajo en el material que actualmente más se utiliza en la fabricación de dispositivos de alta frecuencia: el GaAs. La selección de este semiconductor presenta una ventaja que puede considerarse prácticamente exclusiva: existen trabajos experimentales exhaustivos que facilitan medidas de la velocidad en GaAs con distintas condiciones de dopado, temperatura y campo externo aplicado. Gracias a ello es posible verificar de forma directa y con fiabilidad hasta qué punto los modelos físicos que se emplean en la simulación son capaces de reproducir medidas con una precisión razonable. Asimismo, los distintos parámetros físicos que necesita un simulador de Monte Carlo son bien conocidos en este material.

En esta tesis se investigan también las técnicas experimentales para la medición de la temperatura de ruido a frecuencias de microondas. Las medidas de ruido en el material no sólo han permitido probar la precisión de las simulaciones, también se ilustrará por qué han comenzado a emplearse recientemente como una eficaz herramienta para la cualificación de tecnologías de fabricación.

Por otra parte, el sistema experimental desarrollado ha sido empleado para realizar medidas de ruido en distintos dispositivos de alta frecuencia, siendo especialmente útil en distintos proyectos de investigación europeos. La automatización del sistema de medida ha facilitado su utilización a otros investigadores interesados en caracterizar sus dispositivos, que no han necesitado conocer en profundidad los detalles del manejo de un medidor de ruido.

Objetivos y organización.

El objetivo de esta tesis es desarrollar técnicas numéricas y experimentales que permitan caracterizar el ruido generado por las fluctuaciones de velocidad en GaAs y a frecuencias de microondas.

El primer capítulo describe cómo se ha desarrollado el simulador. Se especifican los modelos utilizados para los distintos mecanismos de dispersión y se propone un refinamiento al método de Monte Carlo aplicable a ámbitos más generales, que permite optimizar la eficiencia mediante la minimización de llamadas a la rutina que genera la secuencia de números aleatorios. Finalmente se comprueba la precisión de los modelos utilizados con distintos ejemplos, en los que se comparan los resultados de la simulación con medidas realizadas por otros investigadores.

El estudio de las distintas técnicas que permiten calcular la densidad espectral de ruido son el objeto del segundo capítulo. Partiendo de los métodos convencionales basados en la transformada rápida de Fourier, se investigan las posibilidades del método de Máxima Entropía. No se ha encontrado ningún trabajo previo que haga uso de esta técnica para la simulación a nivel microscópico del ruido, pero su eficiencia se demostrará con distintos ejemplos prácticos.

El tercer capítulo se centra en uno de los problemas más importantes que presentan los modelos clásicos en las simulaciones por Monte Carlo: la falta de precisión en la caracterización de semiconductores altamente degenerados. Se investigan algunos refinamientos de los mecanismos convencionales de dispersión que o bien son poco conocidos o han sido objeto de controversia. Asimismo, se proponen expresiones analíticas para modelizar el apantallamiento de las vibraciones de red en

presencia de un gas degenerado. También se propone un modelo para simular el acoplo de fonones LO polares y plasmones. Los resultados obtenidos en este capítulo se han reflejado en el desarrollo de un método autoconsistente incorporado en el simulador, que ha sido comprobado contrastando los resultados obtenidos con curvas velocidad-campo experimentales.

El capítulo cuarto está dedicado a la descripción del sistema experimental instalado y utilizado para realizar medidas de la temperatura de ruido en muestras de GaAs altamente dopadas. En este capítulo se describe el proceso de calibración, la caracterización de las muestras y la comparación de las medidas con los resultados de las simulaciones. El principal interés de este capítulo es la presentación de medidas en muestras de GaAs degenerado con niveles de dopado habituales en los contactos óhmicos.

Un resumen de las aportaciones originales que se consideran más importantes, así como un estudio de las líneas de investigación que pueden beneficiarse de los resultados que se han obtenido en esta tesis, constituyen el contenido del quinto y último capítulo.

Finalmente se adjuntan distintos apéndices. En el primero de ellos se describe cómo se han obtenido las expresiones analíticas para las probabilidades de dispersión por la parte iónica de los modos híbridos. A continuación se presenta una descripción de cómo se utiliza el programa de automatización del medidor de ruido, en la que se detalla paso a paso cómo se realiza la calibración del sistema experimental. El tercer apéndice recoge las distintas comunicaciones privadas que se han referenciado en esta tesis. Finalmente, en el último apéndice se describe la estructuración del simulador de ruido autoconsistente.

CAPÍTULO I

DESCRIPCIÓN DEL SIMULADOR

I.1 Introducción

Seguir a los portadores de carga a través del material en el dominio del tiempo: éste es el fundamento del método de Monte Carlo aplicado a la Física de semiconductores. El movimiento de los portadores se interpreta en este método como una sucesión de trayectorias en las que se experimenta la acción de un campo externo, y que son interrumpidas por los distintos mecanismos de dispersión que tienen lugar en el semiconductor. Cada mecanismo está caracterizado por una probabilidad de transición de estados que permite determinar con qué frecuencia se desvía la partícula de la trayectoria impuesta por el campo, cuál es el mecanismo que ha originado su desviación y cuál es el estado de la partícula inmediatamente después de haber sufrido esta dispersión.

Después de un margen de tiempo suficientemente amplio, es posible determinar con precisión el valor de la velocidad media. Conocida ésta y las velocidades instantáneas registradas durante la simulación, se puede obtener la *densidad espectral de fluctuaciones de velocidad* mediante las distintas técnicas que se describen en el capítulo segundo. Esta densidad permite determinar directamente la temperatura de ruido en el material.

Así pues, la información necesaria para caracterizar el ruido en un semiconductor está contenida en la velocidad instantánea de la partícula. Por consiguiente, el primer paso a seguir es obligado: obtener esta velocidad no sólo con una precisión aceptable, sino también con una modelización eficiente que permita abordar la simulación del ruido con exigencias razonables en términos de capacidad de cálculo y memoria. Describir cómo se han abordado estos objetivos es la finalidad de este primer capítulo.

I.2 Estructura del simulador

El simulador desarrollado está basado en el seguimiento de una sola partícula. La simulación de una partícula es suficiente para caracterizar procesos estacionarios que no dependen de coordenadas espaciales, como es el caso del cálculo de la temperatura de ruido de un gas de electrones homogéneo. El material se ha caracterizado con un modelo de tres tipos de valles en la banda de conducción: el valle Γ y los valles satélite L y X [1], [2], [3].

El punto de partida en la simulación consiste en asignar un momento y una energía iniciales al portador de carga. El seguimiento de la partícula en el dominio del tiempo se estructura en los siguientes pasos:

1. *Determinar el tiempo que transcurre hasta que el portador sufre una dispersión.*
2. *Determinar qué tipo de dispersión se ha producido y el estado del portador inmediatamente después de la misma.*
3. *Registrar el valor instantáneo de los parámetros que se deseen calcular (la velocidad en este caso).*
4. *Repetir los pasos anteriores hasta conseguir la convergencia.*

Si sólo hiciera falta calcular valores medios de la velocidad, bastaría con registrar los valores instantáneos inmediatamente antes de cada dispersión para después promediar al término de la simulación. Este procedimiento de calcular promedios es el más sencillo de programar, el más eficiente y el más utilizado, pero no es el más apropiado para hacer cálculos de ruido. Para calcular el espectro de fluctuaciones de velocidad es conveniente disponer de registros de la velocidad instantánea en intervalos de tiempo *equiespaciados*. Existen algoritmos de estimación espectral que permiten calcular espectros con registros de variables a intervalos no regulares [4]. Sin embargo, estos algoritmos están basados en interpolaciones entre puntos y por tanto no resultan recomendables para la estimación de espectros de magnitudes que fluctúan. Por otra parte, también requieren un mayor consumo de memoria debido a que necesitan un registro de los instantes en los que se producen las colisiones.

Así pues, la obtención de las velocidades instantáneas se ha realizado a intervalos regulares durante cada trayectoria, haciendo el cálculo de forma paralela al seguimiento de las colisiones sufridas por la partícula.

El vector de onda se obtiene por integración de la ecuación de movimiento, que en ausencia de un campo magnético externo da lugar a una dependencia temporal del tipo

$$\mathbf{k}(t) = \mathbf{k}(0) + \frac{q\mathbf{F}}{\hbar} t \quad (1.1)$$

siendo \mathbf{F} el campo externo aplicado. A continuación la energía se calcula mediante la relación E - k , en la que se ha incluido un factor de corrección, α , para considerar la no parabolicidad del valle en el que se encuentre el portador,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = E(1 + \alpha E) \quad (1.2)$$

Finalmente la velocidad se obtiene aplicando directamente su propia definición,

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E \quad (1.3)$$

La tabla 1.I muestra los coeficientes de no parabolicidad y los valores de las

	Γ	L	X
$\alpha(\text{eV}^{-1})$	0.834	0.4	0.3
m^*/m_0	0.063	0.22	0.58

Tabla 1.I Coeficientes de no parabolicidad y masas efectivas utilizadas en el simulador.

masas efectivas utilizados por el simulador en cada valle. Estos valores concuerdan

con los utilizados por otros investigadores en simulaciones clásicas, a excepción de la constante de no parabolicidad del valle principal. Habitualmente se han asignado los valores de 0.61 o 0.67 eV⁻¹ para esta constante, que fueron propuestos originalmente por Littlejohn *et al.* [5] y Wang y Hess [6], respectivamente. El valor empleado en las simulaciones de esta tesis ha sido utilizado por Fischetti y Laux [7]. La elección final de este valor ha sido realizada después de una comparación directa de los resultados de la simulación con las distintas características v-F experimentales que se muestran en los ejemplos analizados al final de este capítulo. La incertidumbre en el valor de las constantes de no parabolicidad afecta fundamentalmente a las simulaciones en materiales débilmente dopados. En estos casos el mecanismo mayoritario es la interacción por fonones ópticos polares, que es especialmente sensible a los valores que adoptan estos parámetros.

I.3 Mecanismos de dispersión incluidos

Los mecanismos de dispersión utilizados en el simulador se muestran en la tabla 1.II. La anisotropía en la dispersión angular ha sido considerada en todos los mecanismos a excepción de las transiciones entre valles y la interacción con fonones ópticos no polares, para los cuales puede suponerse que los ángulos entre el vector de onda inicial y el final se distribuyen uniformemente [1]-[3].

La interacción piezoeléctrica y la dispersión por fonones acústicos son mecanismos minoritarios en el GaAs. Para su modelización se han empleado las expresiones analíticas propuestas en la referencia [1].

ELÁSTICOS	INELÁSTICOS
Impurezas ionizadas	Fonones ópticos polares
Fonones acústicos	Transiciones entre valles
Interacción piezoeléctrica	Fonones ópticos no polares

Tabla 1.II. Mecanismos de dispersión considerados en el simulador.

En la dispersión por impurezas ionizadas se han incluido los dos modelos más ampliamente empleados en la bibliografía estudiada: el basado en el potencial apantallado de Brooks-Herring [8], y el de Conwell-Weisskopf [9]. La diferencia existente entre ambos modelos se encuentra en el potencial utilizado para calcular el hamiltoniano de perturbación. En el primer caso este potencial es del tipo

$$V(r) \propto \exp(-\beta r)/r \quad (1.4)$$

siendo β el factor de apantallamiento, mientras que en el segundo caso se asume una dependencia de la forma

$$\begin{aligned} V(r) &\propto 1/r \text{ si } r < b \\ V(r) &= 0 \text{ si } r \geq b \end{aligned} \quad (1.5)$$

siendo b el parámetro de impacto asociado. Si bien se han sugerido numerosos refinamientos [10] a estos dos modelos clásicos, no existe unanimidad en estimar cuál es el más apropiado, ni qué mejoras son más importantes.

Es posible realizar refinamientos sencillos al modelo original de Brooks-Herring que permiten mejorarlo. Entre estos refinamientos destaca la inclusión de los efectos de no parabolicidad, modelizados por Ruch y Fawcett [11]. Estas correcciones han sido adoptadas en el modelo de dispersión por impurezas incluido en el simulador desarrollado.

Asimismo, también es posible realizar refinamientos adicionales modificando un sólo parámetro, el factor de apantallamiento. Una reducción en el factor de apantallamiento se refleja en un aumento en la dispersión por impurezas ionizadas y por tanto en una disminución de la movilidad, gracias a lo cual mejoran las predicciones del modelo de Brooks-Herring; que tradicionalmente ha sido cuestionado por sobrestimar las velocidades medias. No obstante, esta modificación es importante únicamente en condiciones de degeneración, y por tanto será tratada en el tercer capítulo.

Los mecanismos inelásticos comprenden dos interacciones distintas que corresponden a la emisión y absorción del fonón asociado, cuyas energías se muestran en la tabla 1.III [12].

Fonón	LO polar	LO no polar	Γ -L	Γ -X	L-X	L-L	X-X
E (eV)	0.0362	0.0343	0.0227	0.0234	0.0218	0.0250	0.0243

Tabla 1.III. Energías de los fonones asociados a las transiciones inelásticas.

La variación con la temperatura de estas energías, así como de las masas efectivas, constantes de no parabolicidad y potenciales de deformación puede despreciarse en numerosas aplicaciones de interés práctico [1]. No obstante, la diferencia de energías entre los distintos valles es considerablemente más sensible con la temperatura. Para su modelización se han utilizado las expresiones analíticas empíricas propuestas por Blakemore [13], que son

$$E_{\Gamma-L} = 0.333 - \frac{6.05 \cdot 10^{-5} \cdot T^2}{T + 204}; \quad E_{\Gamma-X} = 0.510 - \frac{6.45 \cdot 10^{-5} \cdot T^2}{T + 204} \quad (1.6)$$

De todos los parámetros que deben especificarse en una simulación por Monte Carlo, los potenciales de deformación de las transiciones entre valles son los que han acusado mayores discrepancias entre los distintos investigadores. Tradicionalmente, estos potenciales se han utilizado como factores de ajuste a curvas v-F experimentales. Sin embargo, algunos trabajos recientes publicados en parte durante el desarrollo de esta tesis proporcionan valores de algunos de los parámetros más importantes con discrepancias mínimas; obtenidos mediante distintos métodos numéricos [14]-[17] y experimentales [18], [19]. En estos trabajos, los resultados a los que llegan todos los autores son similares, pero los modelos de transiciones inter-valle utilizados consideran la existencia de distintos fonones para un mismo tipo de transición. Esta peculiaridad impide que los valores finales obtenidos puedan aplicarse directamente al modelo de Conwell, en el que se considera un sólo tipo de fonón con una energía efectiva por cada transición. No obstante, el modelo de Conwell es el que

se emplea habitualmente en las simulaciones por Monte Carlo. Por tanto se ha optado por adoptarlo sin modificaciones, utilizando los potenciales de deformación efectivos que se muestran en la tabla 1.IV, y que han sido calculados por Fischetti en la referencia [12].

Transición	L	Γ -L	Γ -X	L-X	L-L	X-X
Potencial ($\cdot 10^8$ eV/cm)	2.0	5.25	5.48	5.0	5.94	2.99

Tabla 1.IV. Potenciales de deformación utilizados en el simulador. La primera columna corresponde a las transiciones intravalle, asociadas a fonones ópticos no polares.

I.4 Cálculo de la duración de las trayectorias

Para determinar la duración de las trayectorias hay que calcular la probabilidad $P(t)$ de que un portador que sufrió una colisión en $t=0$ sufra su siguiente colisión en el intervalo $[t, t+dt]$. Una vez conocida esta probabilidad, se genera un número aleatorio comprendido entre 0 y 1, que proporciona directamente la duración de cada trayectoria. De este modo, generando una secuencia de números aleatorios uniformemente distribuidos se obtiene un conjunto de trayectorias cuyas duraciones se distribuyen estadísticamente según la probabilidad P : la probabilidad de obtener un tiempo determinado es tanto más elevada cuanto mayor sea el valor de P en ese tiempo. $P(t)$ se puede expresar como [19]

$$P(t)dt = \lambda[k(t)] \exp\left(-\int_0^t \lambda[k(t')]dt'\right)dt \quad (1.7)$$

siendo $\lambda[k(t)]dt$ la probabilidad de que un portador sufra una colisión en un intervalo dt . El valor de $\lambda[k(t)]$ viene dado por

$$\lambda[\mathbf{k}(t)]dt = \sum_{i=1}^N \lambda_i[\mathbf{k}(t)]dt \quad (1.8)$$

donde la suma se extiende a los N posibles mecanismos de dispersión que intervienen en el semiconductor, cuyas respectivas probabilidades λ_i se pueden obtener utilizando distintos modelos que proporcionan expresiones analíticas para λ_i . Generalmente estas probabilidades no tienen integrales analíticas, y por tanto la obtención de la duración de las trayectorias se presenta como un fuerte obstáculo en términos de tiempo de cálculo. Este problema puede evitarse mediante el procedimiento de autodispersión. Este método ha sido implementado en el simulador, y consiste en añadir a los mecanismos que realmente operan en el semiconductor un mecanismo ficticio llamado "autodispersión", que no modifica el vector de onda del portador y que se produce con una probabilidad λ_0 tal que la suma total $\lambda(t)$ es una constante Γ . De este modo la ecuación 1.8 se puede escribir como

$$\lambda(t)dt = \sum_{i=0}^N \lambda_i(t)dt = \Gamma dt \quad (1.9)$$

Esta simplificación permite obtener fácilmente la duración de las trayectorias,

$$t_r = -\frac{1}{\Gamma} \ln(r) \quad (1.10)$$

siendo r un número aleatorio perteneciente a una secuencia que se distribuye uniformemente en el intervalo $0,1$.

En un simulador basado en el método de Monte Carlo, la necesidad de generar secuencias de números aleatorios aparece en distintos apartados del código, no sólo en el cálculo de la duración de las trayectorias. Tradicionalmente los simuladores de Monte Carlo han hecho uso de ordenadores de alta capacidad de cálculo, en los cuales los compiladores de lenguajes como el Fortran o el C ya disponen de funciones propias para generar secuencias de números aleatorios que son válidas para la mayor

parte de las aplicaciones de cálculo intensivo. Sin embargo, el rápido desarrollo de los procesadores ha abierto la interesante posibilidad de poder implementar y ejecutar simuladores de Monte Carlo en ordenadores personales, empleando para ello tiempos de cálculo razonables.

No obstante, los compiladores habitualmente utilizados en los ordenadores personales incluyen funciones de generación de aleatorios que no están pensadas para el cálculo intensivo. La función nativa de C estándar que permite construir una secuencia de aleatorios, `rand()`, requiere en su especificación ANSI C que el número total de aleatorios *distintos* sea superior a 32767. Este número es considerablemente pequeño comparado con el número de veces que se invoca esta función en un simulador de Monte Carlo típico. Debido a ello es preciso utilizar rutinas complementarias de generación de aleatorios. La rutina de generación de aleatorios utilizada en el simulador ha sido propuesta por Press *et al.* en [4].

El valor que puede asignarse a la constante Γ no es arbitrario. Como la probabilidad de autodispersión no puede ser negativa, Γ no puede ser inferior al valor máximo que alcance la suma de las probabilidades de todos los mecanismos reales. Así pues, el valor de t_r que se obtiene mediante esta expresión es, en general, inferior al del tiempo de vuelo real entre dispersiones. En otras palabras, al añadir el mecanismo de autodispersión se está subdividiendo cada trayectoria real en varias trayectorias ficticias. Esta segunda interpretación permite comprender que si se asignara a Γ un valor demasiado alto las trayectorias reales se fraccionarían excesivamente, aumentando innecesariamente el tiempo de simulación sin aportar ninguna información sobre la evolución del vector de onda del portador. Por tanto, el valor más apropiado que debe adoptar esta constante es el máximo de la probabilidad en el intervalo de posibles energías que pueda adquirir la partícula. Sin embargo, incluso con este valor se hace necesario intentar reducir en lo posible el fraccionamiento de las trayectorias.

Para optimizar el procedimiento se han propuesto distintos métodos, el más eficiente de los cuales se basa en seleccionar valores distintos de Γ en cada trayectoria [21]. Este procedimiento tiene el inconveniente de que puede proporcionar

distribuciones erróneas [22]. También se han propuesto procedimientos alternativos basados en la integración directa de la ecuación (1.7), que se puede simplificar mediante la aproximación polinómica de las probabilidades de dispersión, tal y como propone Yorston en [22]. Sin embargo, las aproximaciones analíticas introducen errores adicionales difíciles de calibrar.

Así pues, ¿cómo mejorar la eficiencia de la simulación?

I.5 Optimización de la eficiencia

La técnica de Sangiorgi, Ricco y Venturi [23] permite mejorar la eficiencia del método de autodispersión sin los inconvenientes de los procedimientos citados en el apartado I.4. En esta técnica se divide el intervalo total de energías posibles que puede adquirir la partícula en distintos subintervalos, definiendo para cada uno de ellos una constante Γ_i igual al valor máximo de la probabilidad dentro del intervalo. De este modo se complica la programación de la función que calcula la duración de la trayectoria, puesto que la expresión final de esta duración depende de las energías inicial y final del portador. No obstante, es posible obtener importantes aumentos en la eficiencia. Las mejoras que pueden conseguirse con la técnica de Sangiorgi, Ricco y Venturi son lógicamente dependientes de distintos factores, como el campo, la temperatura o el dopado; y por tanto no se pueden establecer criterios generales que permitan determinar un número de intervalos óptimo para todas las simulaciones. No obstante, es posible realizar refinamientos a esta técnica que permiten mejorar la eficiencia en numerosos casos de interés práctico, tal y como se describe a continuación.

El simulador desarrollado en esta tesis utiliza una función de cálculo de la duración de las trayectorias en la que se discretiza la probabilidad total de dispersión en seis intervalos de energía, que cubren el rango de cero a un valor máximo que puede ser especificado al principio de la simulación. Las simulaciones que aquí se presentan, así como distintos resultados obtenidos en referencias previas [24], [25],

[26] muestran que las energías medias de los portadores no exceden de 0.3 eV para dopados en el rango $10^{15} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ y campos aplicados no superiores a 100 KV/cm. Gracias a ello se puede fijar la energía máxima en torno a 1 eV en la mayor parte de los casos prácticos, pues no existe una probabilidad apreciable de que la partícula pueda llegar a superar este valor durante la simulación. En caso de que así ocurra, el simulador está preparado para generar un mensaje de error que se almacena en un fichero. No obstante, esta situación no se ha producido en ninguna de las simulaciones presentadas en esta tesis.

La anchura de los intervalos de energía puede seleccionarse arbitrariamente sin modificar la expresión para calcular la duración de las trayectorias. Gracias a esta peculiaridad es posible incrementar la eficiencia del método, calculando los extremos de los intervalos de energía óptimos mediante una rutina de optimización multidimensional basada en el algoritmo de Powell [4]. Para poder utilizar este algoritmo es preciso especificar una función error que debe ser minimizada, pero ¿cómo definir esta función? En principio debería minimizarse la diferencia entre la razón total de dispersión y la función escalonada que la discretiza. Sin embargo, es posible mejorar este criterio teniendo en cuenta que la energía adoptada por el portador no se distribuye uniformemente en todo el margen de energías posibles: unas energías son más probables que otras. En general, la energía más probable dependerá de la temperatura, el campo aplicado y la concentración de impurezas. No obstante, puesto que las energías medias en todas las simulaciones presentadas en esta tesis no han excedido 0.3 eV, se ha adoptado el criterio de dar prioridad a los intervalos comprendidos entre 0 y 0.3 eV frente a los de energías mayores. Esta prioridad se ha establecido asignando un factor peso que modifica la diferencia entre la función escalonada y la razón total de dispersión, de manera que el intervalo comprendido entre 0 y 0.3 eV tiene un peso estadístico superior al del intervalo 0.3 - 1 eV. Este criterio permite definir la función que debe minimizarse de la forma

$$F_{\text{err}}(E_1, E_2, E_3, E_4, E_5, E_6) = \frac{\lambda_M}{\lambda_N} \sum_{i=0}^N (F_{\Gamma,i} - \lambda_i) + \sum_{i=N+1}^M (F_{\Gamma,i} - \lambda_i) \quad (1.11)$$

$F_{err}(E_i)$ es la función a minimizar con el algoritmo de optimización, $F_{r,i}$ es la función escalonada, E_i son las energías que delimitan los seis subintervalos, y N , M son el número de puntos comprendidos en 0 - 0.3 eV y 0 - 1 eV, respectivamente, para los cuales se ha calculado la razón total de dispersión, λ .

El algoritmo de optimización realiza llamadas a la función error con distintos valores de los parámetros E_i , asumiendo que E_i pueden adoptar cualquier valor. Sin embargo, es necesario que las variables optimizadas cumplan dos requisitos adicionales: en primer lugar todas deben encontrarse en el intervalo (0,1). En segundo lugar también debe verificarse que E_i sea mayor que E_j si i es mayor que j ; pues de lo contrario el algoritmo proporcionaría como variables óptimas unas energías que definirían intervalos superpuestos. Para simular esta restricción, se ha incluido en la función error una rutina de verificación que devuelve un valor máximo de 10^{30} cada vez que el algoritmo llama a la función definiendo intervalos de energía que se superponen, o utilizando algún valor de E_i que no se encuentre dentro del intervalo (0,1).

La figura 1.1 muestra un ejemplo de la optimización de los intervalos de energía en los que se discretiza la razón total de dispersión, en una simulación típica con campos comprendidos entre 0 y 10 KV/cm. La concentración de impurezas seleccionada es de 10^{15} cm^{-3} , y la temperatura 300 K. El modelo de dispersión por impurezas utilizado es el de Conwell-Weisskopf. En el caso de un intervalo (figura 1.1a) se hace uso de la expresión 1.10. En la figura 1.1b se emplea el método de San Giorgi *et al.* para seis intervalos regulares, mientras que en la figura 1.1c se optimizaron los intervalos de energía minimizando F_{err} .

La optimización consume un tiempo de cálculo mínimo comparado con el tiempo total de simulación (del orden de 2-4 segundos, utilizando un ordenador personal con un procesador de 200 MHz), y además una vez implementada es insensible a cualquier cambio posterior que pudiera hacerse para perfeccionar la estadística de los mecanismos de dispersión: sus datos de entrada son un vector con la

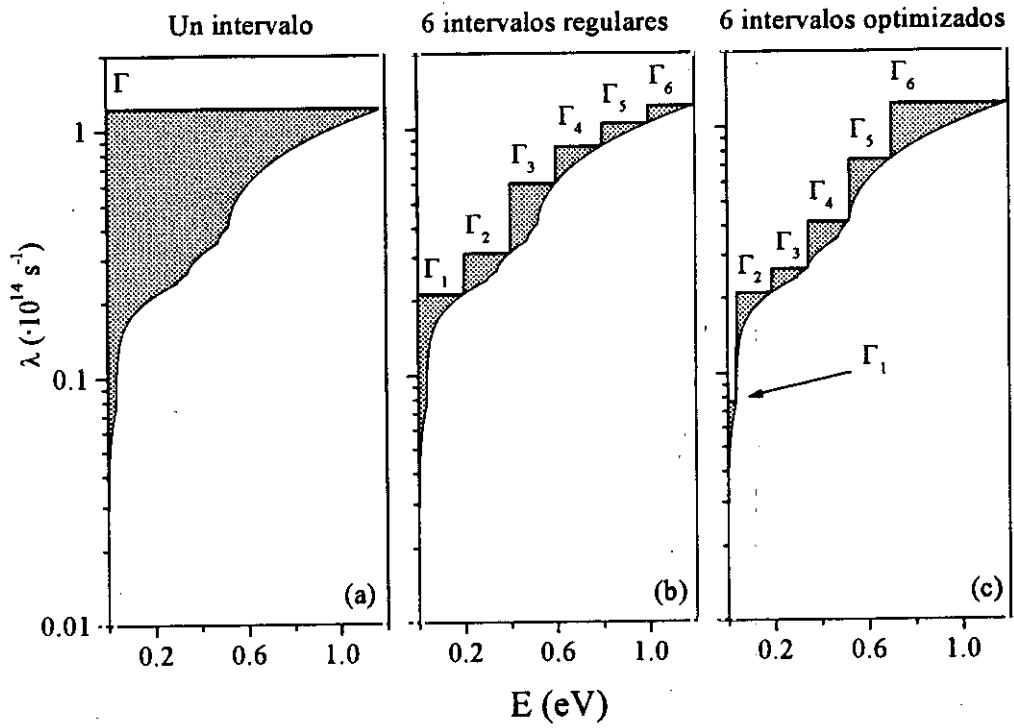


Figura 1.1. Discretización de la razón total de dispersión en el valle principal. (a): Método convencional. (b): Método de Sangiorgi et al. (c): Método de Sangiorgi con intervalos optimizados.

probabilidad total de dispersión en función de la energía y los valores iniciales de los intervalos, que también se especifican al principio de la simulación. Dado que la razón total de dispersión es diferente para cada tipo de valle, Γ , L, X, es preciso realizar tres optimizaciones distintas.

En la figura 1.2 se muestra el efecto producido por la optimización en el porcentaje de autodispersiones seleccionadas, con respecto al total de colisiones. El criterio utilizado mantiene la reducción de autodispersiones aproximadamente constante en todos los campos. En el resto de las simulaciones que se presentan en el apartado siguiente se obtuvieron mejoras en la eficiencia similares.

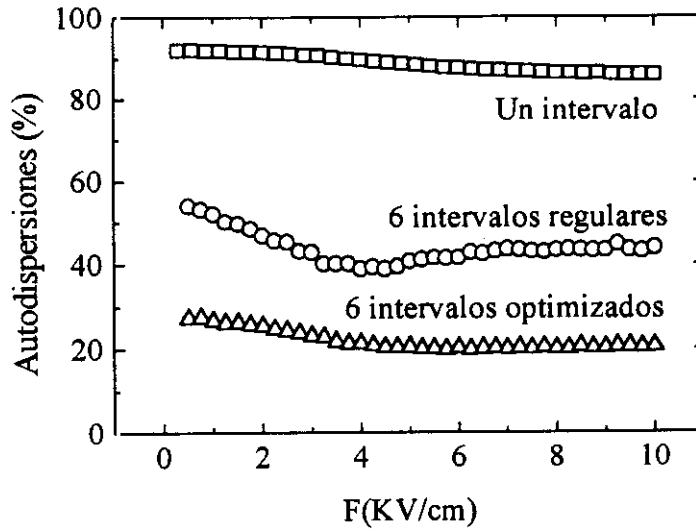


Figura 1.2. Porcentaje de mecanismos de autodispersión seleccionados en la simulación realizada entre 0 y 10 KV/cm.

I.6 Resultados preliminares

Para comprobar los primeros resultados obtenidos con el simulador se han utilizado las características v-F medidas mediante distintos procedimientos [27], [28], así como los datos experimentales más recientes de Masselink [29]. Las medidas de Masselink aportan distintas ventajas de interés. En primer lugar, fueron realizadas en guías de onda rectangulares en banda Ka (35 GHz). La caracterización a esta frecuencia permite evitar la formación de dominios en las muestras, y por tanto inhomogeneidades en la distribución de carga para valores del campo en los que la muestra presenta una movilidad diferencial negativa (efecto Gunn). Estas inhomogeneidades son difíciles de calibrar en un sistema experimental, y por tanto las medidas en guías de onda permiten obtener con más precisión los valores del campo eléctrico para los cuales se obtiene la velocidad máxima. El empleo de técnicas modernas de crecimiento epitaxial para la fabricación de las muestras, MBE y MOCVD, es otra gran ventaja aportada por los trabajos experimentales más recientes.

Gracias a estas técnicas puede obtenerse un alto grado de calidad cristalina y homogeneidad en el dopado. Los canales de las muestras utilizadas en las medidas tienen longitudes de 3.5 mm.

La figura 1.3 muestra una comparación directa de los resultados del simulador con los obtenidos por otros investigadores [11], [12] así como con las medidas de Masselink. Las velocidades calculadas en esta tesis tanto a 77 como a 300 K son muy similares a las obtenidas en otras simulaciones, y permiten determinar las características experimentales con una precisión que puede considerarse dentro del margen de reproducibilidad de las medidas.

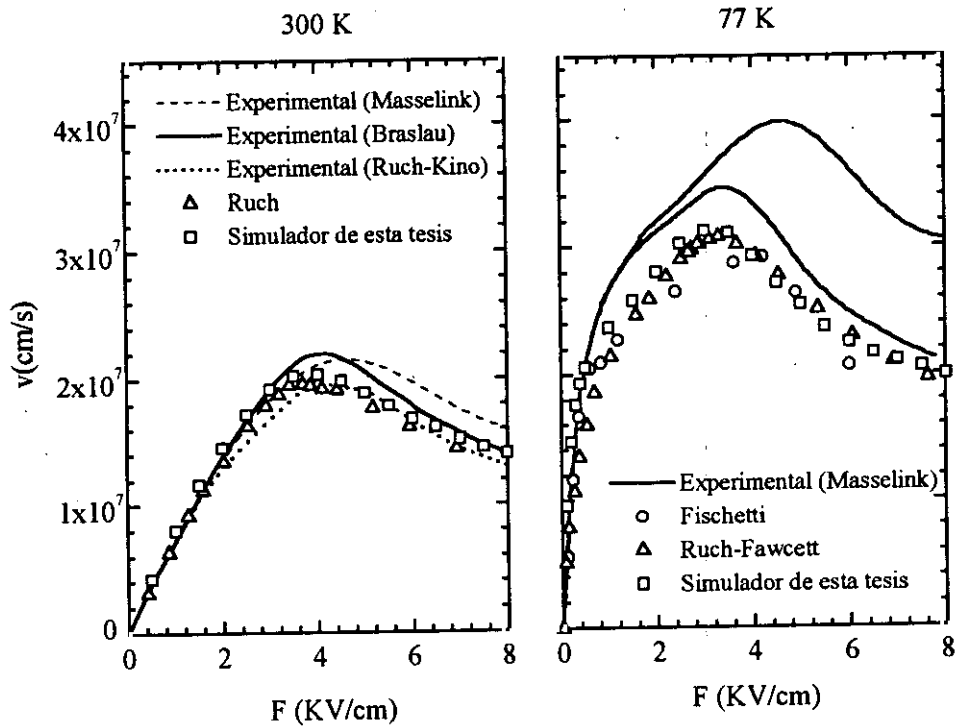


Figura 1.3 Características v - F para una concentración de impurezas de 10^{15} cm^{-3} .

Las curvas experimentales correspondientes a la concentración de impurezas de $N_d=10^{15} \text{ cm}^{-3}$ fueron obtenidas a 77 K con dos muestras gemelas fabricadas

mediante epitaxia por haces moleculares, y se muestran para ilustrar la repetibilidad de la tecnología y del proceso de medida [30].

El comportamiento fuertemente no lineal de la curva v-F a 77 K queda reflejado tanto en las medidas como en las simulaciones; y es debido al balance entre la emisión y absorción de los fonones ópticos polares. Este mecanismo es el dominante en GaAs débilmente dopado. La probabilidad de que se absorba un fonón es proporcional al factor de Fermi N_q , dado por

$$N_q = \frac{1}{1 + \exp(\hbar\omega / k_B T)} \quad (1.12)$$

siendo $\hbar\omega$ la energía del fonón. La probabilidad de emisión es proporcional a N_q+1 . A 300 K N_q es del orden de la unidad, pero a 77 K tiene un valor muy inferior. Debido a ello, la absorción es prácticamente despreciable a estas temperaturas. Por otra parte, para que exista una emisión importante de fonones es preciso que el campo aplicado sea suficientemente intenso como para que los portadores adquieran la energía necesaria, obteniéndose como resultado una fuerte pendiente de la característica v-F en los campos más débiles, que se interrumpe cuando la emisión de fonones comienza a ser relevante. En el capítulo segundo se ilustrará cómo se refleja este comportamiento no lineal en la función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad.

En la figura 1.4 se hace una comparación de las velocidades calculadas con los dos modelos de dispersión por impurezas ionizadas que se han incluido en el simulador, así como con las velocidades medidas por Masselink. El dominio de la dispersión por fonones ópticos polares deja de experimentarse cuando existen concentraciones de impurezas moderadas. Así se ilustra en la simulación a 77 K, en donde el comportamiento no lineal a campos intermedios prácticamente ha desaparecido.

La tabla 1.V ilustra los tiempos de cálculo empleados en la obtención de las curvas mostradas en las figuras 1.3 y 1.4. El porcentaje máximo de autodispersiones obtenido en todos los casos se mantiene aproximadamente en torno a un 30%. La escasa sensibilidad de este factor con el campo, la temperatura y el dopado revela la capacidad del procedimiento utilizado para adaptarse a distintas funciones de probabilidad.

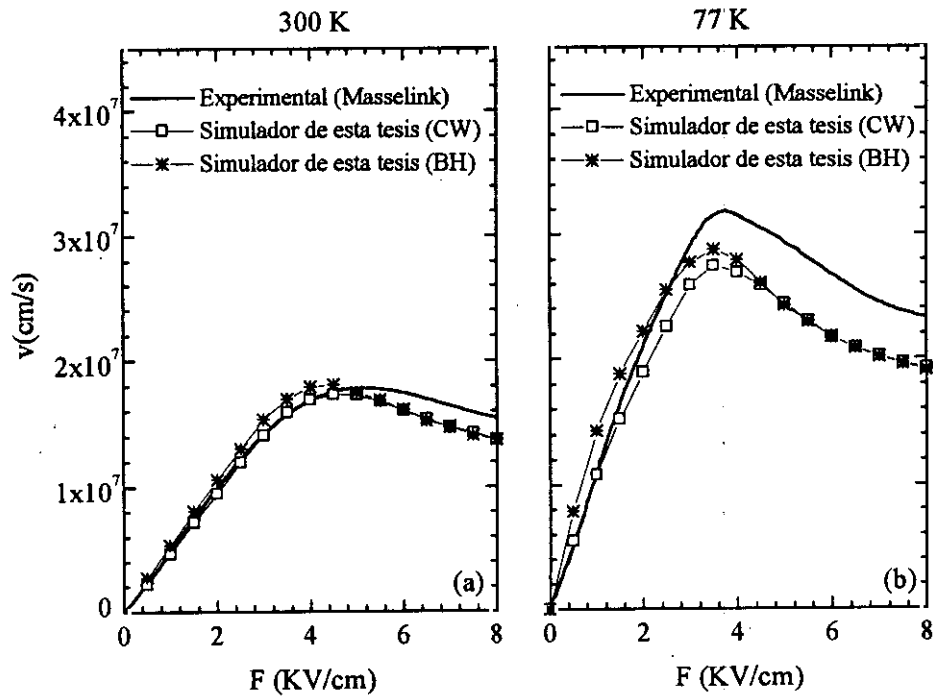


Figura 1.4. Características v - F para concentraciones moderadas de impurezas. (a): $N_d = 9 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. (b): $N_d = 3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. (CW): simulación con el modelo de Conwell-Weisskopf. (BH): simulación con el modelo de Brooks-Herring.

N_D (cm ⁻³)	T (K)	Modelo	T_{calc}	Autodispersiones
10^{15}	300	CW	8 min 15"	27%
10^{15}	77	CW	7 min 50"	23%
$9 \cdot 10^{16}$	300	CW	12 min 34"	28%
$9 \cdot 10^{16}$	300	BH	13 min 14"	35%
$3 \cdot 10^{16}$	77	CW	11 min 46"	22%
$3 \cdot 10^{16}$	77	BH	12 min 07"	27%

Tabla I.V. Tiempo de cálculo y porcentaje máximo de autodispersiones en todas las características v-F calculadas. Las simulaciones se realizaron en un ordenador personal con un procesador de 200 MHz.

I.7 Conclusiones

Los refinamientos estudiados en la estimación de la duración de las trayectorias se consideran muy útiles para mejorar la eficiencia del simulador. La utilización de una rutina de optimización multidimensional en la discretización de los intervalos de energía ha demostrado reducir sustancialmente el número de veces que es necesario invocar la rutina de generación de aleatorios. Esta reducción es especialmente interesante en la obtención de espectros de ruido, en los que es necesario conseguir no sólo la convergencia de la velocidad media, sino también la de sus fluctuaciones.

Los modelos utilizados en la simulación permiten reproducir características v-F experimentales a 77 y 300 K en material no degenerado; obteniéndose un grado de precisión similar al conseguido con otras simulaciones encontradas en la bibliografía. La comparación con estos resultados experimentales a distintas temperaturas y concentraciones de impurezas muestra discrepancias que se localizan en los campos más elevados, donde existe una población importante en los valles satélites. Estas discrepancias se manifiestan en una infravaloración de las velocidades medias en la

zona de movilidad diferencial negativa, y podrían haberse reducido reajustando los potenciales de deformación. En concreto, un aumento del potencial de deformación de las transiciones entre los valles Γ y L [31], [32] hubiera mejorado el ajuste a las curvas experimentales. Sin embargo, las discrepancias son similares en magnitud al grado de reproducibilidad de estas curvas. Este hecho permite que los potenciales utilizados en las simulaciones v-F que se han presentado en este capítulo sean también los que se utilicen en las simulaciones de ruido. De hecho, las estimaciones en la zona en que las discrepancias experimentales es menor (la zona de electrones calientes con población mayoritariamente en el valle principal) se considera excelente.

Las diferencias en las velocidades obtenidas con los potenciales de Conwell-Weisskopf y Brooks-Herring confirman que el segundo proporciona generalmente velocidades superiores al primero. No obstante, esta sobreestimación es moderada en los dopados simulados en este capítulo, y prácticamente nula en la zona de movilidades diferenciales negativas. En estas condiciones ambos modelos predicen prácticamente las mismas velocidades debido a la escasa influencia de la interacción con impurezas ionizadas en campos elevados. Será necesario recurrir a dopados mayores para poder confirmar cuál de los dos modelos se ajusta a los resultados experimentales con mayor precisión. Las simulaciones de ruido que se presentarán en el próximo capítulo utilizarán preferentemente el modelo de Conwell-Weisskopf, debido a que con el de Brooks-Herring se obtuvo una optimización de los subintervalos menos eficiente.

CAPÍTULO II

TÉCNICAS DE ESTIMACIÓN ESPECTRAL UTILIZADAS

II.1 Introducción

El parámetro más empleado para la caracterización experimental del ruido en alta frecuencia es la temperatura de ruido. Este parámetro se define para dispositivos de una puerta de dos formas equivalentes [33],

$$T_N(f) = \frac{S_v(f)}{4K \operatorname{Re}\{Z(f)\}} \quad (2.1a)$$

o bien

$$T_N(f) = \frac{S_i(f)}{4K \operatorname{Re}\{1/Z(f)\}} \quad (2.1b)$$

siendo S_v y S_i las densidades espectrales de fluctuaciones de tensión y corriente, K la constante de Boltzmann y Z la impedancia diferencial del dispositivo. Tanto las densidades espectrales de fluctuaciones como la impedancia diferencial de una muestra finita de material homogéneo son parámetros que pueden obtenerse de la simulación de Monte Carlo, si se dispone de un registro suficientemente amplio de velocidades instantáneas, así como de la característica v - F del material [34]-[36].

En un gas de electrones homogéneo en estado estacionario, la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad se puede obtener mediante el teorema de Wiener-Khintchine,

$$S_v(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} C(t) \exp(-j\omega t) dt = 4 \int_0^{\infty} C(t) \cos \omega t dt \quad (2.2)$$

siendo $C(t)$ la función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad, definida como

$$C(t) = \langle \delta v(t') \delta v(t'+t) \rangle \quad (2.3)$$

donde $\delta v(t)$ es la diferencia entre la velocidad en el instante t y la velocidad media, y el promedio se puede realizar bien sobre la variable t' o bien sobre un número elevado de partículas. En un material no degenerado, el valor del coeficiente de difusión del material se puede obtener a partir de la densidad espectral en el origen

$$D = \frac{S_v(0)}{4} \quad (2.4)$$

Para estudiar las fluctuaciones en la corriente es preciso tener en cuenta que hay dos parámetros que fluctúan: el número y la velocidad de los portadores. La simulación del ruido puede simplificarse si no se consideran las fluctuaciones en el número de los portadores, tal y como se ha hecho en esta tesis. Esta aproximación es válida en numerosos casos prácticos a frecuencias de microondas y superiores, pues las constantes de tiempo asociadas a los procesos en los que existen fluctuaciones en el número de los portadores, como por ejemplo mecanismos de generación-recombinación y centros de captura de portadores, son normalmente muy superiores al nanosegundo. No obstante, las fluctuaciones en el número de portadores pueden ser importantes en determinados dispositivos, como el diodo Schottky, en donde originan el ruido "shot".

Si la densidad de portadores se considera constante, el espectro de fluctuaciones de velocidad permite obtener la temperatura de ruido a partir de la expresión

$$T_N(f) = \frac{qS_v(f)}{4k\mu_d(f)} \quad (2.5)$$

siendo $\mu_d(f)$ la movilidad diferencial del material.

Así pues, este capítulo está dedicado, esencialmente, a la obtención de $S_v(f)$. En los apartados II.2 y II.3 se describe cómo se ha aplicado el teorema de Wiener-Khintchine en el simulador. En el apartado II.4 se centra la atención en el estudio del interés que pueden tener las técnicas de Máxima Entropía en el ámbito de las simulaciones de Monte Carlo. Las posibilidades de los métodos implementados en el simulador se ilustrarán y compararán en el quinto apartado con diversos ejemplos. Finalmente se presentan cálculos de ruido y coeficientes de difusión en distintos casos prácticos, junto con algunas comparaciones con resultados experimentales encontrados en la bibliografía.

II.2 La función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad

El simulador desarrollado permite seleccionar la técnica a utilizar en el cálculo de la función de autocorrelación. La primera opción que ofrece está basada en el algoritmo propuesto por Brunetti y Jacoboni [37]. En esta opción se realiza un registro de N velocidades a intervalos regulares $i\Delta t$ durante un tiempo total $N\Delta t$. Una vez transcurrido este tiempo es posible determinar la función de autocorrelación C en el instante $k\Delta t$ a partir de los productos $v(i\Delta t)v((i-k)\Delta t)$, los cuales se promedian en i para cada k constante. Este promedio proporcionará C al término de la simulación, una vez que se haya obtenido la velocidad media, a partir de la expresión

$$C(k\Delta t) = \langle v(i\Delta t)v((i-k)\Delta t) \rangle - (\bar{v})^2 \quad (2.6)$$

La segunda opción ofrecida por el simulador calcula este promedio mediante el teorema de correlación,

$$C(k\Delta t) = \left\langle \left| \text{FFT}^{-1} \{ \text{FFT}(v_n) \} \right|^2 \right\rangle - (\bar{v})^2 \quad (2.7)$$

siendo

$$\text{FFT}(x_n) = \sum_{k=0}^{N-1} x(n\Delta t) \exp(2\pi jkn / N); \quad (2.8a)$$

$$\text{FFT}^{-1}(x_n) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} x_k \exp(-2\pi jnk / N) \quad (2.8b)$$

las transformadas discretas de Fourier directa e inversa, respectivamente, de la variable genérica x . En ambos casos el promedio se realiza en el tiempo: se divide en N' subintervalos el tiempo total que se reproduce el movimiento de la partícula en el semiconductor y se determina la transformada doble en cada uno de ellos, calculando el valor medio al término de la simulación.

II.3 Cálculo del espectro: integración directa y transformadas rápidas

Una vez conocida la función de autocorrelación, el espectro se puede obtener mediante el teorema de Wiener-Khintchine. Las integrales de Fourier presentan dificultades en su cálculo por el comportamiento fuertemente oscilatorio que puede alcanzar el integrando en las frecuencias más altas. En el simulador desarrollado se han implementado dos técnicas distintas para integrar la función de autocorrelación. La primera de ellas está basada en aplicar directamente la transformada rápida discreta a la función de autocorrelación, es decir

$$\int_0^{\infty} C(t) \cos(\omega t) dt \approx \Delta t \text{Re}\{\text{FFT}(C_n)\} \quad (2.9)$$

Esta técnica es una alternativa interesante para cualquier simulador de Monte Carlo por su considerable eficiencia, si bien requiere seleccionar con precaución la duración del intervalo de muestreo. La transformada discreta puede ser una aproximación muy

deficiente, especialmente si la función de autocorrelación decae con lentitud y el producto $\omega\Delta t$ no es despreciable frente al valor final de la integral [4]. Por otra parte, el algoritmo de transformada rápida impone restricciones importantes que afectan a la resolución del espectro: la función de autocorrelación debe obtenerse en un número total de puntos que ha de ser una potencia entera de 2. Asimismo, la duración de los intervalos de muestreo impone directamente las frecuencias a las que se obtiene el espectro, dado que la resolución del mismo es

$$\Delta f = \frac{1}{N\Delta t} \quad (2.10)$$

En las estimaciones espectrales que emplean esta técnica, la elección entre aumentar N o Δt es crítica. La primera alternativa exige inevitablemente aumentar la memoria disponible en el ordenador. En las referencias estudiadas se han encontrado algoritmos de transformadas rápidas que utilizan técnicas de superposición para no mantener simultáneamente en memoria toda la función de autocorrelación, pero son difícilmente aplicables a un simulador de Monte Carlo por no ser suficientemente eficientes [4], [38]. Por otra parte, un aumento en Δt es costoso en términos de tiempo de cálculo. Aunque se mantiene el mismo número de intervalos y por tanto el mismo número de velocidades instantáneas a calcular, al aumentar la duración de cada intervalo también aumenta el número de dispersiones que deben calcularse entre dos registros de velocidades consecutivos.

La segunda técnica implementada en el simulador para calcular la densidad espectral se basa en la integración directa de la función de autocorrelación por la regla de los trapecios. Es considerablemente menos eficiente que la primera, pero presenta la gran ventaja de que pueden seleccionarse las frecuencias a las que se quiere calcular el espectro sin ningún tipo de restricciones.

Las fluctuaciones estadísticas del espectro pueden reducirse con distintos procedimientos. En el simulador se ha incorporado la posibilidad de modular la amplitud de la función de autocorrelación mediante el uso de funciones que permiten suavizar el truncamiento en el dominio del tiempo. Existen dos formas de utilizar estas

funciones: aplicando la modulación directamente desde el origen (aplicación de una ventana) o bien a partir de tiempos en los que la función de autocorrelación tiene un valor despreciable frente al valor en el origen (aplicación de un taper). Las funciones moduladoras más comúnmente utilizadas como ventanas o tapers son tres: Hann, Bartlett y Welch, que se muestran en la figura 2.1. Todas ellas han sido implementadas en el simulador.

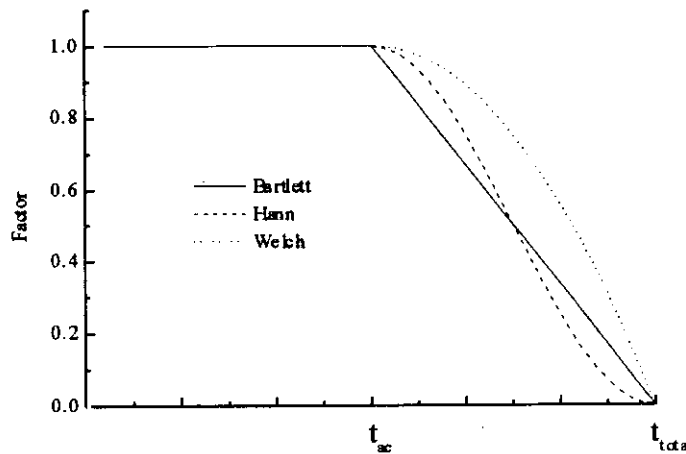


Figura 2.1. Funciones moduladoras empleadas como tapers en el simulador.

II.4 Implementación del Método de Máxima Entropía

El método de Máxima Entropía (MaxEnt) está basado en el concepto de entropía en transmisión de información [39]-[41]. Una secuencia temporal de una variable almacena una cantidad de información que tiene asociada una entropía. Al igual que la entropía en termodinámica establece el grado de desorden en un sistema

de partículas, la entropía en transmisión de información establece el grado de aleatoriedad de una secuencia temporal. Imponer máxima entropía a la secuencia equivale a establecer que de todos los espectros posibles que puede adoptar la secuencia, el más probable es el que menos información contiene.

El principio básico sobre el que se sustenta el método es tan general que ha permitido su aplicación en ámbitos muy diversos: reconstrucción de imágenes, predicción de sismos, análisis espectrales en astrofísica, predicciones meteorológicas, etc. La entropía H asociada a una variable temporal x se calcula mediante su relación directa con la densidad espectral de la variable S_x , a partir de la expresión

$$H = \frac{1}{4W} \int_{-W}^W \ln[S_x(f)] df \quad (2.12)$$

siendo W la frecuencia más alta a la cual S_x tiene un valor significativo.

Cuando se simula un estado estacionario, la relación impuesta por el teorema de Wiener-Khintchine entre la densidad espectral S_x y la función de autocorrelación C constituye una restricción adicional que debe tenerse en cuenta al aplicar la condición de máxima entropía. Cuando se impone esta condición, puede demostrarse que el espectro de máxima entropía que satisface el teorema de Wiener-Khintchine sólo tiene polos, es decir, es de tipo autorregresivo:

$$S_x(\omega) = \frac{G}{\left| 1 + \sum_{i=1}^M b_i \exp(j\omega i \Delta t) \right|^2} \quad (2.13)$$

donde M , el número de polos del espectro, es un número entero *finito*. Los parámetros b_i y el factor de ganancia G están determinados por los registros de la variable x_i , $i=1 \dots N$ mediante un sistema de ecuaciones lineales. Estos parámetros reciben el nombre de coeficientes de predicción porque pueden ser utilizados para

predecir el comportamiento de la variable en tiempos muy superiores a los empleados en el muestreo.

La estabilidad del desarrollo autorregresivo dado por la ecuación 2.13 depende en gran medida de la técnica utilizada en la estimación de los coeficientes de predicción. Las elevadas exigencias en términos de tiempo de cálculo y almacenamiento de memoria que ya requiere de por sí un simulador de Monte Carlo, limitan considerablemente las posibilidades de seleccionar un método óptimo para resolver el sistema de ecuaciones de los coeficientes. Una técnica de resolución directa como el método de descomposición de Choleski proporciona una excelente estabilidad. Sin embargo, no es adecuada para un simulador de Monte Carlo por sus elevadas exigencias en términos de memoria y tiempo de cálculo. Por esta razón se ha adoptado el procedimiento propuesto por Haykin en [42], basado en la resolución recursiva mediante el método de Levinson. Este procedimiento ha sido implementado en una función C de estimación espectral [4], que es la empleada en el simulador.

Numerosos casos prácticos de espectros de ruido se caracterizan por tener una variación con la frecuencia en forma de función lorentziana con una o varias constantes de decaimiento efectivas. Estas constantes dependen de los tiempos de relajación de los mecanismos de dispersión que operan en el material. En los espectros lorentzianos, el método de Máxima Entropía ofrece el gran aliciente de poder realizar un excelente ajuste del espectro con muy pocos términos del desarrollo: de hecho, considerando tan sólo la primera potencia del desarrollo ya se obtiene un espectro muy similar al lorentziano en muy amplios márgenes de frecuencia. Para $M=1$ la serie autorregresiva de la ecuación 2.13 se puede escribir como

$$S_v(\omega)|_{M=1} = \frac{G}{|1 + b_1 \exp(j\omega \Delta t)|^2} ; \quad (2.14a)$$

y en el caso de que el producto de la frecuencia ω por el intervalo de muestreo Δt sea despreciable frente a la unidad se obtendría

$$S_v(\omega) \approx \frac{G}{(1+b_1)^2 + (b_1\omega\Delta t)^2} \quad (2.14b)$$

La aproximación 2.14b se cumple ampliamente en las simulaciones de Monte Carlo habituales; donde se calculan espectros de fluctuaciones de velocidad hasta frecuencias de varios THz, utilizándose para ello intervalos de muestreo del orden de femtosegundos. Gracias a esta peculiaridad se puede conseguir una rápida convergencia en el cálculo de las densidades espectrales de ruido lorentzianas, tal y como se ilustrará en los ejemplos que se describen a continuación [43].

II.5 Comparación entre las distintas técnicas utilizadas

Ejemplo 1. Espectros de ruido lorentzianos

En esta simulación se emplearon los mecanismos de dispersión siguientes:

- a) Impurezas ionizadas con el modelo de Conwell-Weisskopf.
- b) Absorción y emisión de fonones ópticos polares.
- c) Interacción con fonones acústicos
- d) Interacción piezoeléctrica

Para garantizar la forma lorentziana del espectro se ha utilizado un campo suficientemente débil, 0.5 KV/cm. La simulación se ha realizado a 300 K con una concentración de impurezas ionizadas de $N_d=10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Aplicación directa del teorema de Wiener Khintchine

La figura 2.2 muestra la convergencia de la función de autocorrelación utilizando el algoritmo de Brunetti (ecuación 2.6) en comparación con la técnica basada en la transformada rápida discreta (ecuación 2.7), en donde se ha variado el número total de subintervalos N' , manteniendo constante la duración de los mismos, $N\Delta t$. La simulación fue realizada con un ordenador personal dotado con un

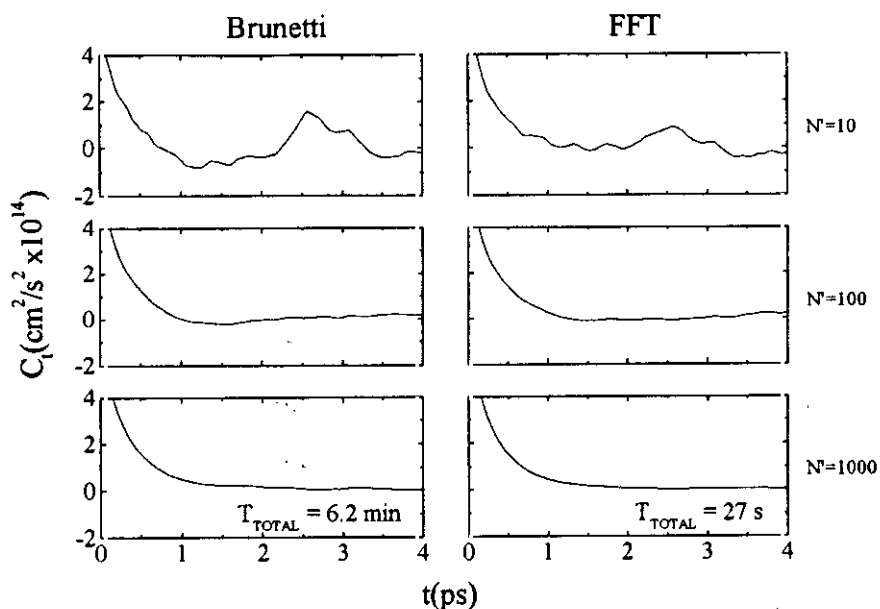


Figura 2.2. Convergencia de las funciones de autocorrelación. Brunetti: Estimación con el algoritmo de Brunetti-Jacoboni. FFT: Estimación utilizando el teorema de correlación. $N=2048$, $\Delta t=2 \text{ fs}$. T_{TOTAL} : Tiempo total de cálculo para la simulación más precisa.

procesador de 200 MHz y 16 Mb de memoria RAM. La diferencia en tiempos de cálculo ya es suficientemente importante en este caso, a pesar de que se han utilizado valores de N y N' relativamente bajos en comparación con los empleados en las simulaciones realizadas en esta tesis. En general una estimación espectral precisa exigirá órdenes de magnitud superiores para ambos parámetros, lo que aumentará aún más las diferencias.

La figura 2.3 ilustra el efecto que produce la aplicación de cada uno de los tapers citados en el apartado II.3 sobre la función de autocorrelación. En esta segunda simulación se ha aumentado la duración de los subintervalos mediante un incremento de N , debido a que los espectros que se obtuvieron integrando la función de autocorrelación de la figura 2.2 resultaron ser excesivamente ruidosos. No obstante, la simulación preliminar presentada en la figura 2.2 permitió estimar cuál es el tiempo que necesita la función de autocorrelación para alcanzar un valor despreciable. Esta información especifica el tiempo a partir del cual puede aplicarse el taper sobre la

función sin que exista el riesgo de desvirtuar excesivamente la estimación espectral. En el caso de la figura 2.3 el taper se aplicó a partir de 1 ps.

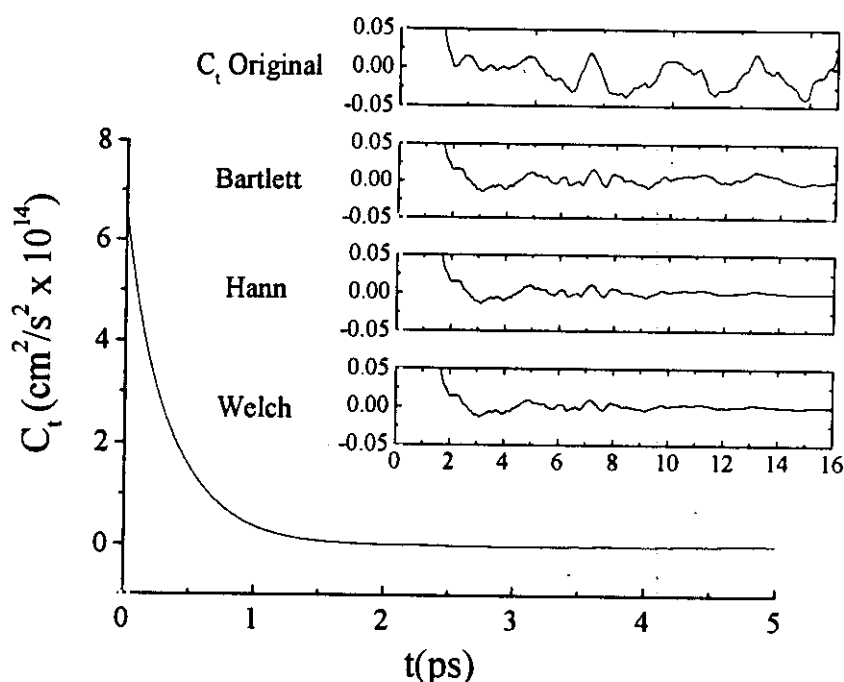


Figura 2.3. Efecto producido por el uso de las distintas funciones moduladoras utilizadas en el simulador. La representación de 0 a 5 ps corresponde a la función original. Las cuatro curvas superiores corresponden a una ampliación de la zona de autocorrelaciones débiles. $\Delta t = 2$ fs, $N' = 1000$, $N = 8192$.

Las mejoras en el espectro son claramente suficientes para justificar la utilización de tapers, y la figura 2.4 así lo demuestra. En ella se pueden apreciar los resultados obtenidos después de aplicar el teorema de Wiener-Khintchine mediante integración directa. En este caso, las moduladoras de Hann y Welch proporcionan espectros muy similares y ligeramente más satisfactorios que la moduladora de Bartlett. No obstante, las diferencias entre estas moduladoras no se consideran suficientemente importantes como para justificar una investigación exhaustiva sobre las condiciones en las cuales una función puede ser más o menos ventajosa que otra. Por otra parte, el consumo en términos de tiempo de cálculo que requiere la aplicación de los tapers es mínimo comparado con la duración total de las

simulaciones. Por tanto, tampoco existen diferencias importantes en términos de

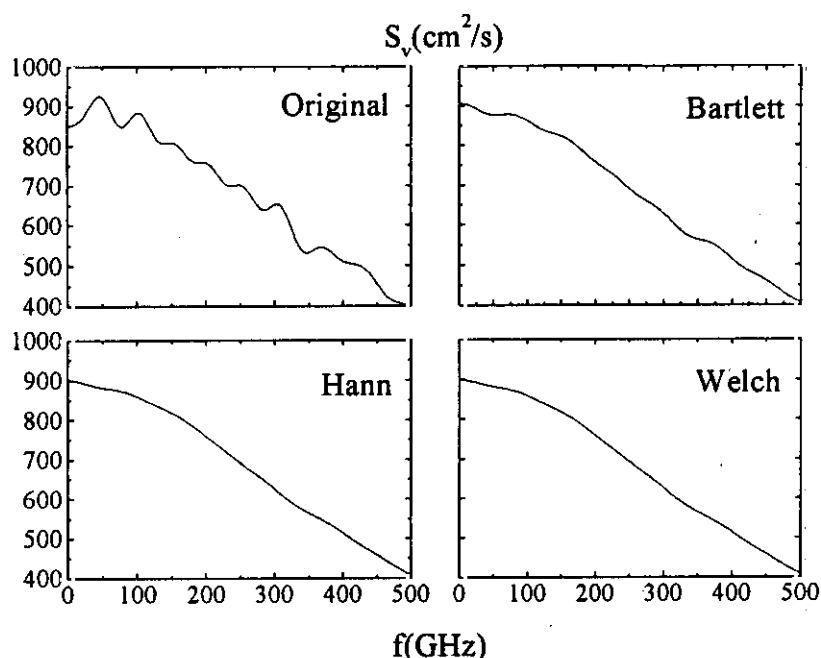


Figura 2.4. Densidad espectral obtenida con los tapers implementados en el simulador. Cálculos efectuados mediante integración directa de la función de autocorrelación, con una resolución de 10 GHz.

eficiencia.

El coeficiente de difusión resultante se muestra en la figura 2.5. Cada punto corresponde a una simulación completa en el que se mantienen constantes todos los parámetros de muestreo excepto N' . Tal y como puede apreciarse, en este método N' debe alcanzar valores superiores a 1500 para conseguir una buena convergencia.

La figura 2.6 muestra el espectro completo. La densidad espectral se ha calculado mediante integración directa de la función de autocorrelación con un taper de Hann, a una resolución de 10 GHz. Los tiempos de cálculo correspondientes son proporcionales a N' , lo que indica que la mayor parte del tiempo se consume en la simulación de las dispersiones, siendo despreciable el tiempo empleado en la integración de la función de autocorrelación.

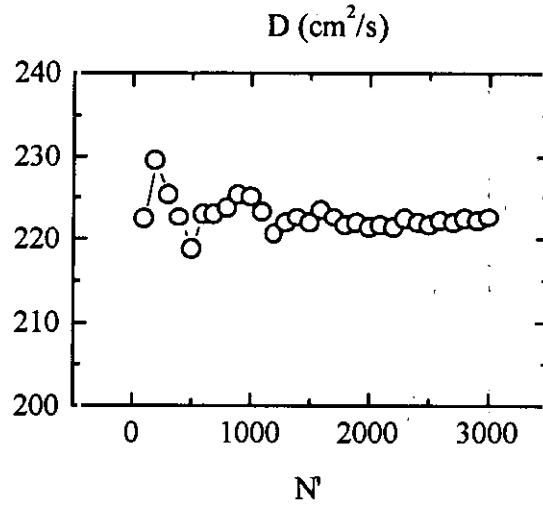


Figura 2.5. Coeficiente de difusión, obtenido por integración directa de la función de autocorrelación.

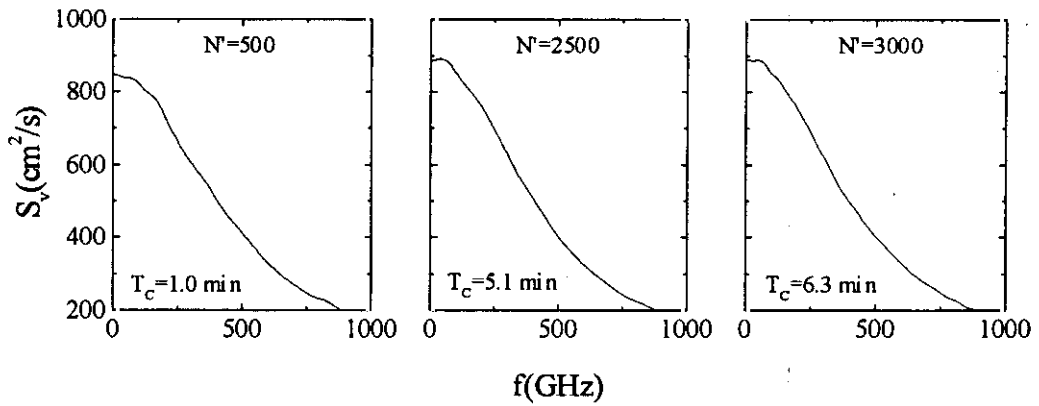


Figura 2.6. Espectro obtenido por aplicación directa del teorema de Wiener Khintchine. $\Delta t=2$ fs, $N=8192$. T_c : Tiempos de cálculo empleados en cada simulación.

Estimaciones MaxEnt

Para obtener un espectro preciso con el método MaxEnt es necesario que el producto $N\Delta t$ constituya un tiempo suficiente para que la función de autocorrelación alcance un valor despreciable. La figura 2.7 muestra la convergencia del coeficiente de difusión para distintos parámetros de muestreo. El valor final alcanzado coincide con el de la simulación anterior dentro un margen de un 5%, siendo el coeficiente de difusión estimado por Máxima Entropía ligeramente superior. Esta discrepancia es debida al error cometido en la simulación previa a causa de la aplicación del taper a la función de autocorrelación.

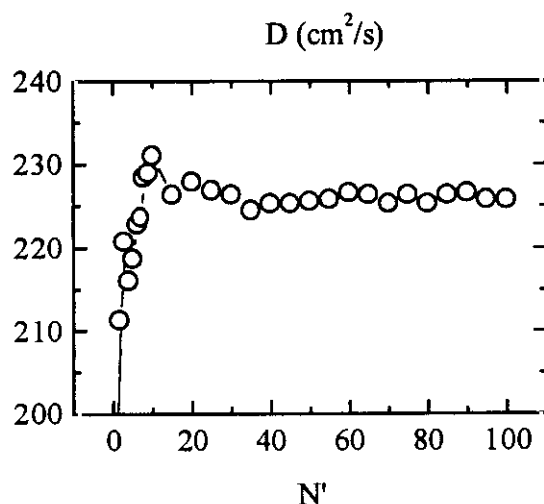


Figura 2.7. Coeficiente de difusión obtenido por Máxima Entropía, utilizando 50 polos. $\Delta t=5$ fs, $N=60000$.

La convergencia del espectro en el dominio de la frecuencia se muestra en la figura 2.8. La aproximación de primer orden ya adopta una forma lorentziana, si bien es necesario un número mayor de polos en el desarrollo autorregresivo de la ecuación 2.14 para realizar una buena estimación en las bandas de frecuencias más bajas.

Los tiempos de cálculo empleados en este caso para conseguir una buena convergencia del espectro son significativamente menores. Las diferencias pueden

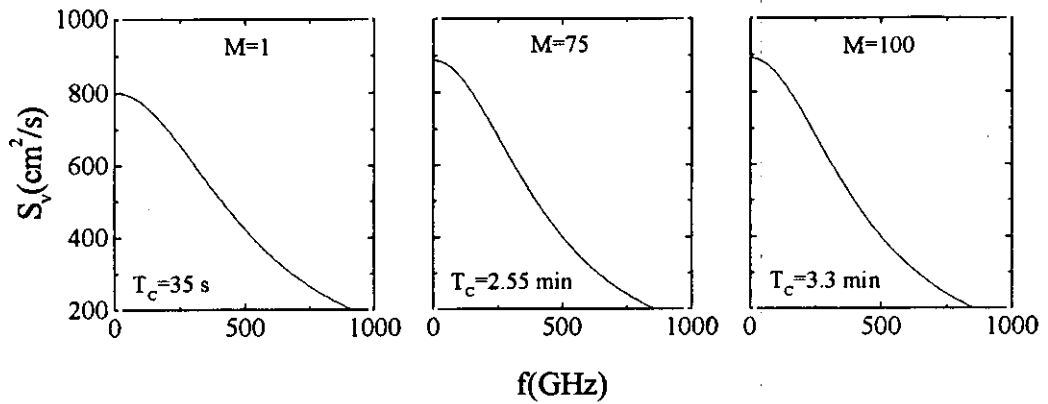


Figura 2.8. Convergencia del espectro obtenido por el método de Máxima Entropía. Resolución de 10 GHz. $\Delta t=5$ fs, $N=60000$, $N'=40$.

acentuarse si se necesitan resoluciones mayores que la utilizada; puesto que una vez conocidos los coeficientes de predicción, la integración de la función de autocorrelación es más lenta que el cálculo del desarrollo autorregresivo.

Ejemplo 2. Espectros no lorentzianos

Para conseguir un espectro no lorentziano se ha aplicado un campo suficientemente intenso como para permitir una importante flujo de portadores a los valles satélites, tal y como se muestra en la tabla 2.I. A los mecanismos de dispersión utilizados en el ejemplo anterior se añadieron todas las transiciones entre valles satélites, así como las transiciones originadas por fonones ópticos no polares en los valles L.

v_m (cm/s)	E_m (eV)	f_r	f_L	f_x
$1.5 \cdot 10^7$	0.13	45%	53%	2%

Tabla 2.I. Valores medios obtenidos en la simulación para un campo de 7.5 KV/cm. $N_d=10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $T=300$ K.

Aplicación directa del teorema de Wiener Khintchine

La existencia de transiciones a valles satélites origina importantes diferencias entre los tiempos de relajación del momento y la energía. En estas condiciones la función de autocorrelación adquiere valores negativos, tal y como se puede observar en la figura 2.9. Este comportamiento de la función de autocorrelación se manifiesta

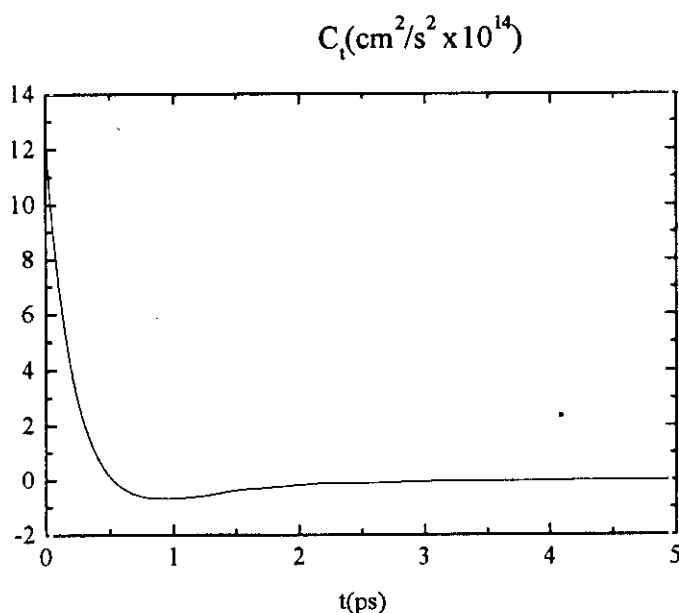


Figura 2.9. Función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad para un campo eléctrico de 7.5 KV/cm.

en el espectro mediante un crecimiento en la zona de frecuencias bajas, dando lugar a una densidad espectral cualitativamente distinta a la obtenida en el ejemplo anterior. En este caso la aplicación de un taper a la función de autocorrelación es considerablemente más problemática. La presencia de una zona positiva y otra negativa en el intervalo donde la función tiene valores no despreciables confiere una mayor importancia al comportamiento de la función para tiempos mayores. Utilizando los parámetros de muestreo del primer ejemplo se obtuvo una sobreestimación del coeficiente de difusión superior al 10%. Esta sobreestimación es debida al uso del propio taper, que esta vez se aplica en tiempos en los que la función es negativa.

Así pues, la elección del tiempo a partir del cual debe aplicarse el taper se basa en buscar un compromiso entre la eficiencia del mismo y la degradación del espectro en el origen. La convergencia de los espectros obtenidos se ilustra en la figura 2.10. El máximo corresponde a una frecuencia f_{\max} para la cual

$$\frac{f_{\max}}{4} = \frac{1}{t_{\min}} \quad (2.15)$$

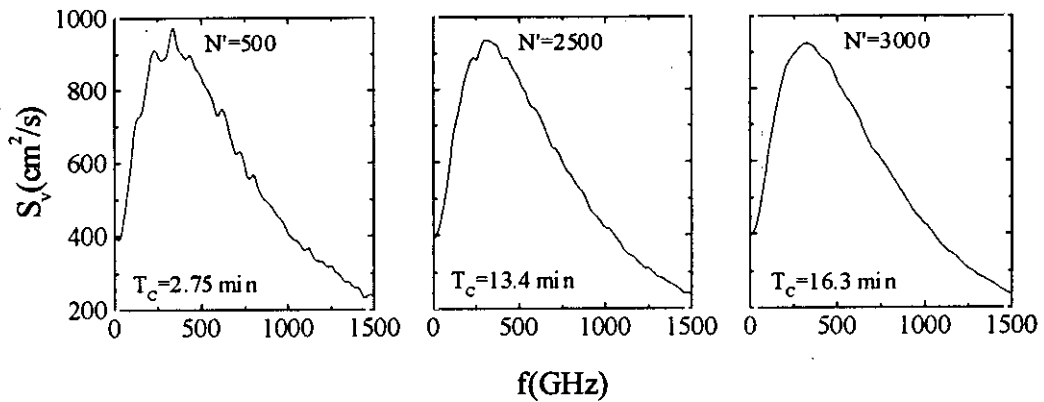


Figura 2.10. Convergencia del espectro obtenido por aplicación directa del teorema de Wiener Khintchine. Resolución de 10 GHz. $\Delta t = 2$ fs, $N = 16384$.

siendo t_{\min} el tiempo donde se localiza el mínimo de la función de autocorrelación.

En las referencias estudiadas se han encontrado ciertas discrepancias en la estimaciones espectrales calculadas para campos similares. Las simulaciones presentadas por Grondin *et al.* en la referencia [44] presentan distintos picos a frecuencias submilimétricas, que se atribuyeron a ruido de partición y comportamiento balístico en el valle principal. Sin embargo, ni el espectro de la figura 2.10 para $N' = 3000$ ni los presentados por González y Pardo en las referencias [45] y [46] para campos similares al utilizado en esta simulación exhiben tales picos.

Estimaciones MaxEnt

En este segundo ejemplo, la duración del intervalo de muestreo que permite una convergencia más rápida en el método MaxEnt es mayor que en el ejemplo primero, debido a que la función de autocorrelación tarda más tiempo en alcanzar valores despreciables. También fue necesario emplear un número apreciablemente mayor de polos, debido a la forma no lorentziana de la densidad espectral. El aumento en el número de polos implica un aumento significativo en el tiempo de cálculo dedicado a la estimación espectral. Así se puede apreciar en la figura 2.11, donde se

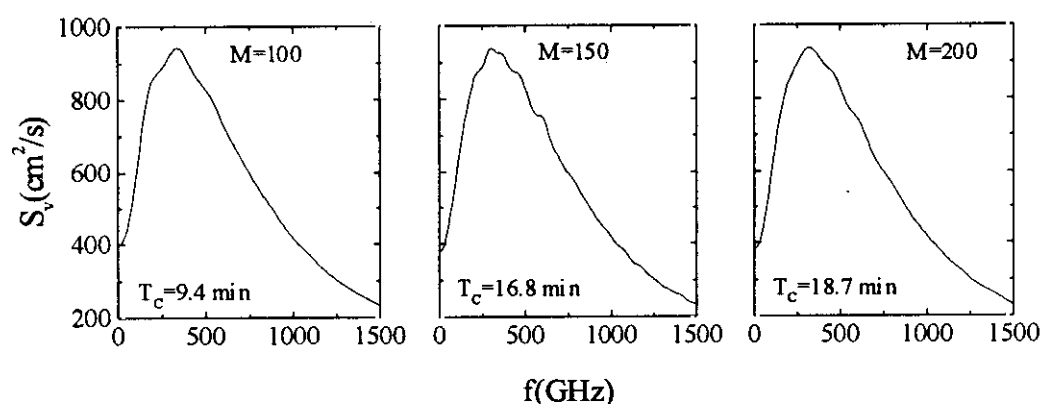


Figura 2.11. Convergencia del espectro obtenido por el método de Máxima Entropía. Resolución de 10 GHz. $\Delta t=50$ fs, $N=60000$, $N'=40$.

muestra cómo evoluciona la convergencia del espectro. En los tres casos se mantiene el mismo tiempo total que se simula la partícula y por tanto el mismo número de colisiones. Esta vez las estimaciones MaxEnt son más lentas, si bien la diferencia entre los tiempos de cálculo empleados por ambas estimaciones no supera el 15% de la simulación más eficiente.

II.VI Resultados de las simulaciones

Ejemplo 3. Simulaciones a distintas temperaturas

En este ejemplo se han utilizado los mismos mecanismos de dispersión empleados en el segundo ejemplo del apartado II.V. La figura 2.12 muestra las simulaciones realizadas a 77 y 350 K, en donde se han superpuesto las curvas obtenidas con las dos técnicas de estimación espectral investigadas.

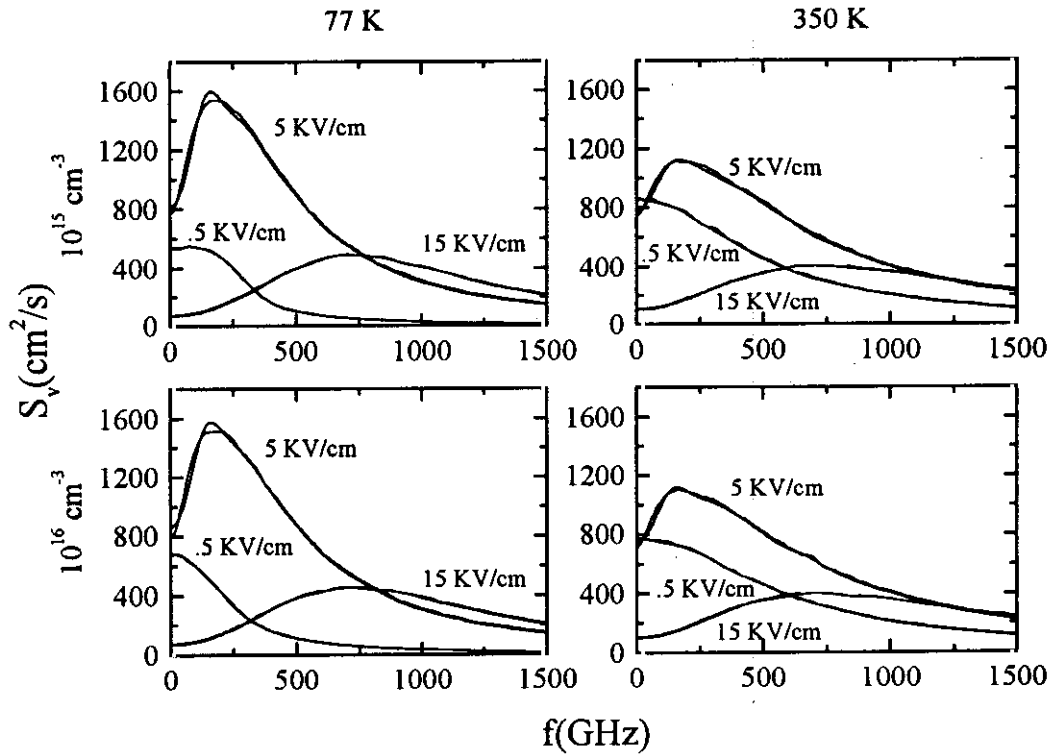


Figura 2.12. Densidad espectral de fluctuaciones de velocidad en distintas condiciones de dopado, temperatura y campo aplicado. Resolución de 10 GHz.

La única discrepancia apreciable que se observa al aplicar ambas técnicas de estimación se encuentra en las simulaciones a 5 KV/cm y 77 K. Esta discrepancia se manifiesta fundamentalmente en el valor del espectro en el origen y en la amplitud del

máximo. Las estimaciones a 350 K indican que el campo intermedio de 5 KV/cm es también en este caso más problemático que cualquiera de los dos extremos, si bien las discrepancias son notablemente menores. Así pues, la convergencia del espectro requerirá tanta mayor atención cuanto más brusco sea el aumento de la densidad espectral con la frecuencia.

La figura 2.12 también refleja otros detalles que son dignos de mención. En primer lugar destaca el hecho de que a campos elevados, especialmente cuando la velocidad media alcanza su máximo valor, un aumento de la temperatura física del material se traduce en una notable reducción de la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad en la banda de frecuencias milimétricas. Este hecho demuestra la importancia que puede alcanzar el ruido de partición generado por el material a causa de las transiciones a valles satélites, que para un valor intermedio del campo adquieren mayor protagonismo a bajas temperaturas que las interacciones con las vibraciones de la red.

La influencia del dopado en el ruido cuando los campos son débiles es otro detalle que también puede observarse en la figura 2.12. A dopados bajos la interacción por fonones ópticos polares es la principal responsable de que la densidad espectral sufra un fuerte aumento con la temperatura física de la muestra; aumento que no se produce cuando predomina la interacción con impurezas ionizadas. En ambos casos el decaimiento con la frecuencia es claramente más suave al aumentar la temperatura. Este efecto es consistente con una termalización más rápida, producto de un mayor número y eficiencia de las dispersiones que tienen lugar en el material.

La figura 2.12 también muestra el ligero aumento de la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad en la zona de bajas frecuencias, a 77 K y 0.5 KV/cm, y que se produce únicamente en el caso de bajos dopados. Este efecto no se observa en los otros tres casos, cuyos espectros presentan un comportamiento claramente lorentziano.

El aumento de la densidad espectral en la zona de bajas frecuencias revela la existencia de autocorrelaciones negativas a un campo débil, tal y como se puede apreciar con más claridad en la figura 2.13, donde se muestran las funciones de

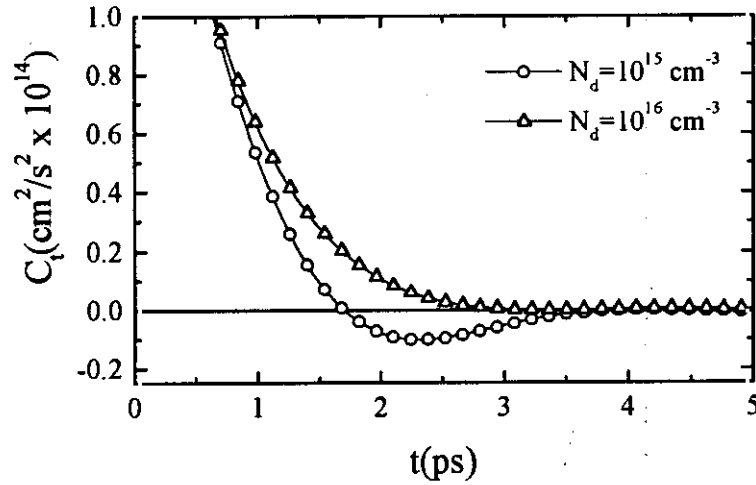


Figura 2.13. Función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad a 77 K, para un campo de 0.5 KV/cm.

autocorrelación correspondientes a los espectros calculados a 77 K que se representaron en la figura 2.12. Este comportamiento de la función de autocorrelación se asocia habitualmente, en un material homogéneo, a las transiciones entre el valle principal y los satélites [44] - [47]. Sin embargo estas transiciones no son, en este caso, las responsables de las autocorrelaciones negativas. La tabla 2.II muestra las probabilidades de ocupación correspondientes a la simulación con el dopado de 10^{15} cm^{-3} . Tal y como puede apreciarse, la probabilidad de ocupación de los valles satélites es nula.

La aparición de autocorrelaciones negativas puede explicarse recordando la característica v-F correspondiente, ya mostrada en el capítulo primero (figura 1.3). El

v_m (cm/s)	E_m (eV)	f_r	f_L	f_x
$2.0 \cdot 10^7$	0.02	100%	-	-

Tabla 2.II. Resultados de la simulación a 77 K y 0.5 KV/cm, con un dopado de 10^{15} cm^{-3} . E_m y v_m son la energía media y velocidad media, respectivamente. f_r, L, x son las probabilidades de ocupación en los valles principal y satélites.

campo aplicado corresponde a la zona de fuerte pendiente de la característica. En estas condiciones los portadores no alcanzan energías suficientes para acceder a los valles satélites, pero pueden acelerarse hasta alcanzar energías próximas a la del fonón óptico polar, teniendo una probabilidad no nula de emitirlo a costa de una fuerte reducción de su velocidad. Así pues, los electrones que alcanzan mayores velocidades son también los que sufren frenados más violentos; dando lugar a la aparición de autocorrelaciones negativas de forma análoga a como ocurre en las transiciones a los valles satélites.

Ejemplo 4. Coeficientes de difusión y temperatura de ruido

La figura 2.14 muestra los coeficientes de difusión obtenidos por el simulador

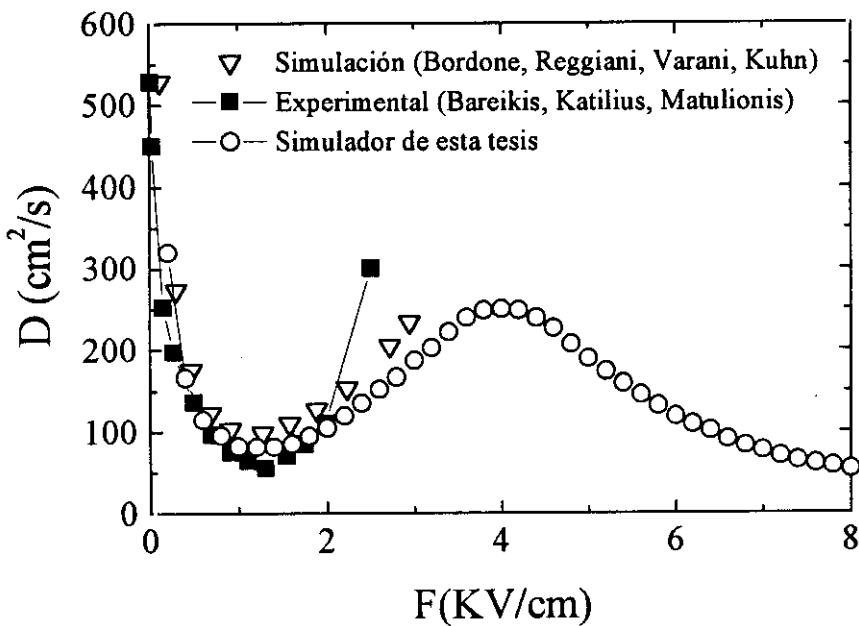


Figura 2.14. Coeficientes de difusión en condiciones alejadas del equilibrio a 77 K, para un dopado de 10^{15} cm^{-3} . Espectro calculado por el método de Máxima Entropía.

en condiciones alejadas del equilibrio, para un dopado de 10^{15} cm^{-3} y a 77 K. Los resultados se comparan con las simulaciones realizadas por Bordone *et al.* [48], así

como con las medidas de ruido pulsadas a 10 GHz de Bareikis *et al.* [49], [50]. Los resultados de las simulaciones predicen con gran precisión las medidas salvo en los campos más elevados, en donde el experimento obtiene valores del coeficiente de difusión apreciablemente mayores. Estas discrepancias han suscitado dudas sobre la precisión de las medidas realizadas, debido a la dificultades que entraña la calibración en medidas pulsadas, así como la dificultad de garantizar campos eléctricos uniformes en las muestras utilizadas [48], [51]. No obstante, se pueden conciliar las medidas con las simulaciones si se tiene en cuenta que en las medidas los portadores no han alcanzado una termalización completa para valores elevados de campo.

La característica v-F que se mostró en el capítulo primero (figura 1.3) y la función de autocorrelación representada en la figura 2.15 permiten hacer una estimación de la distancia que utilizan los portadores para termalizarse: a 3 KV/cm la función de autocorrelación necesita unos 10 ps hasta alcanzar un valor despreciable, y la velocidad media que alcanzan los portadores a 77 K en un material débilmente dopado es del orden de $3 \cdot 10^7$ cm/s. En estas condiciones, puede estimarse que el

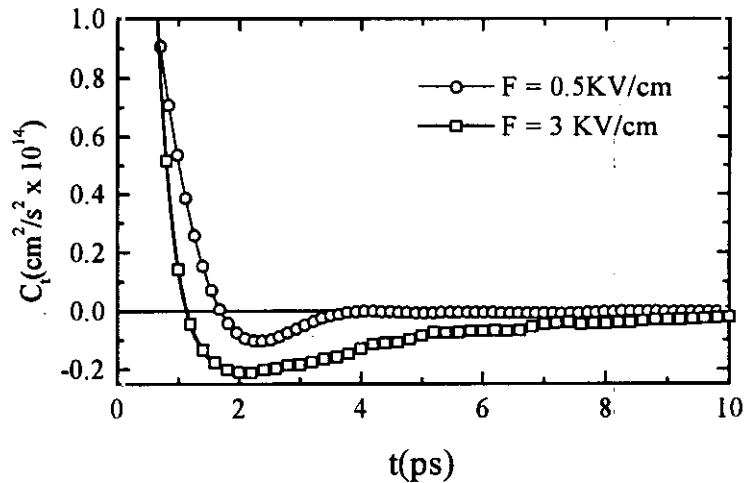


Figura 2.15. Función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad a 77 K, para un dopado de 10^{15} cm⁻³.

portador de carga podría necesitar unas 3 micras para alcanzar una termalización

completa, longitud comparable a las dimensiones de la muestra utilizada en las medidas, que es de 7.5 micras. En cambio, a 0.5 KV/cm una estimación análoga fijaría la distancia de termalización en torno a 0.8 micras. Así pues, cabe esperar que las medidas en los campos más elevados no puedan ser comparables directamente con una simulación de un estado estacionario.

La hipótesis de que los coeficientes de difusión se sobrestiman porque no se ha alcanzado una termalización total es consistente con los resultados obtenidos por González *et al.* [52], [53] y Shiktorov *et al.* [54]; en donde los cálculos realizados en régimen transitorio predicen sobrestimaciones del coeficiente de difusión en la zona de bajas frecuencias. Para valores de campo más bajos la comparación entre las simulaciones y las medidas es excelente, puesto que tanto la velocidad como el tiempo necesario para obtener una termalización completa disminuyen notablemente.

A pesar de la falta de termalización, la temperatura de ruido final no sufre discrepancias importantes en este caso. La termalización parcial tiene como consecuencia una sobreestimación tanto de la velocidad como del coeficiente de

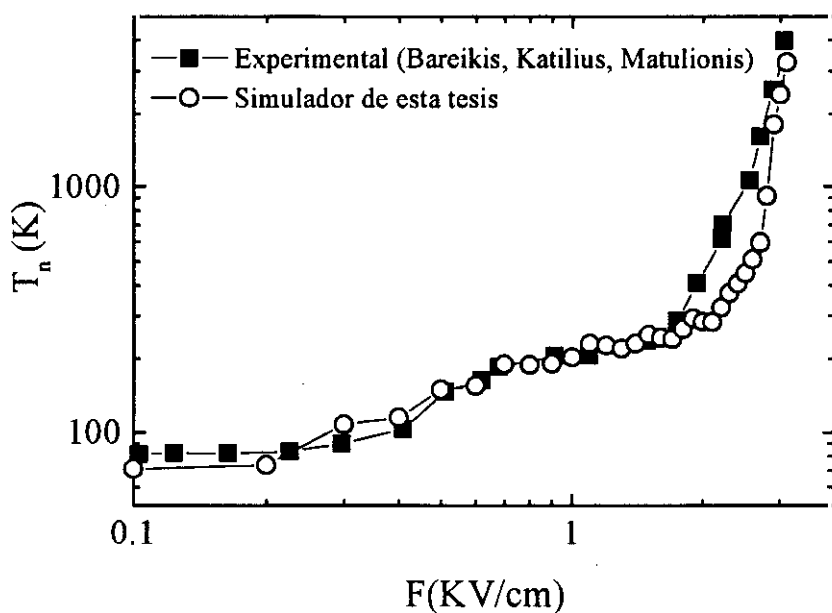


Figura 2.16. Temperatura de ruido simulada a 77 K para un dopado de 10^{15} cm^{-3} en comparación con la curva experimental.

difusión, de modo que al calcular el cociente ambos errores se compensan parcialmente en los campos más elevados. La figura 2.16, que muestra una comparación directa de la temperatura de ruido simulada con la obtenida experimentalmente por Bareikis *et al.* confirma esta observación.

No obstante, no puede esperarse que esta compensación de errores se manifieste de forma generalizada. Cuando la muestra es excesivamente corta el campo eléctrico al que se alcanza la velocidad máxima aumenta considerablemente, haciendo que el fuerte incremento de la movilidad diferencial reduzca apreciablemente la temperatura de ruido [55].

La figura 2.17a muestra una comparación de la simulación a 300 K con las medidas de Bareikis *et al.* Estas dos curvas de ruido también concuerdan con la

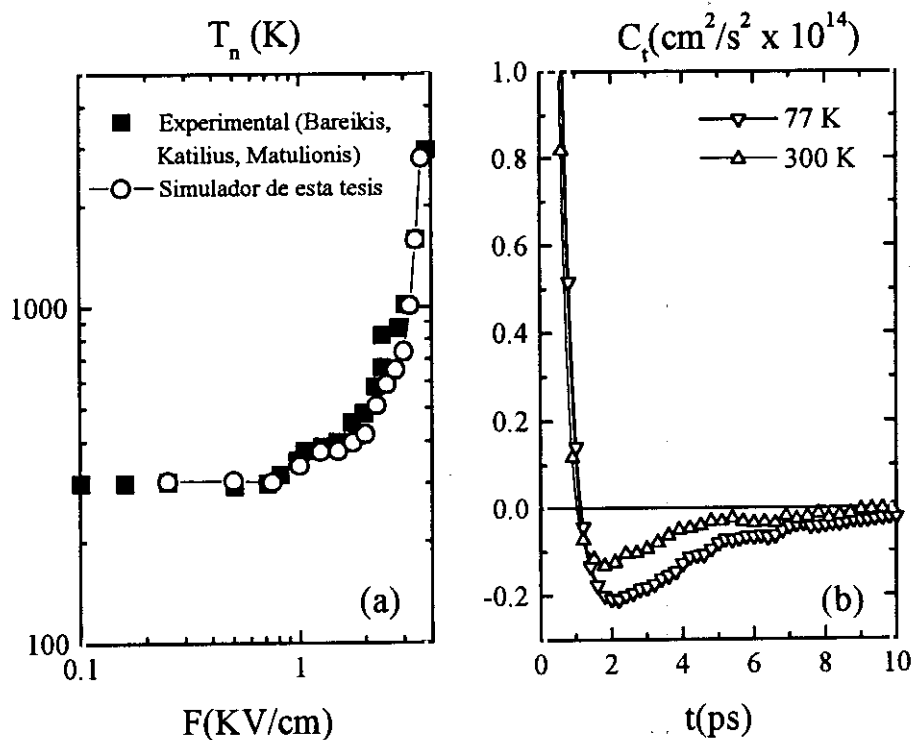


Figura 2.17. Temperatura de ruido simulada a 300 K, para un dopado de 10^{15} cm^{-3} en comparación con la curva experimental (a), y función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad a un campo de 3 KV/cm (b).

presentada recientemente por Varani *et al.* [56]. En estas condiciones tanto la velocidad media como las distancias necesarias para obtener la termalización se reducen apreciablemente, tal y como se observa en la figura 2.17b.

La variación de los coeficientes de difusión con la temperatura y el dopado se puede observar en la figura 2.18. Esta variación es mínima para los valores de campo más elevados, donde la interacción por impurezas ionizadas es despreciable. No obstante, el comportamiento cualitativo del coeficiente de difusión es fuertemente dependiente tanto de la temperatura como del dopado. El encrestamiento de la curva del coeficiente de difusión debido al ruido de partición se observa con gran claridad a 77 K (figura 2.18a). En los dopados más débiles, la fuerte reducción del coeficiente de difusión a campos moderados realza el ruido de partición. Esta reducción es

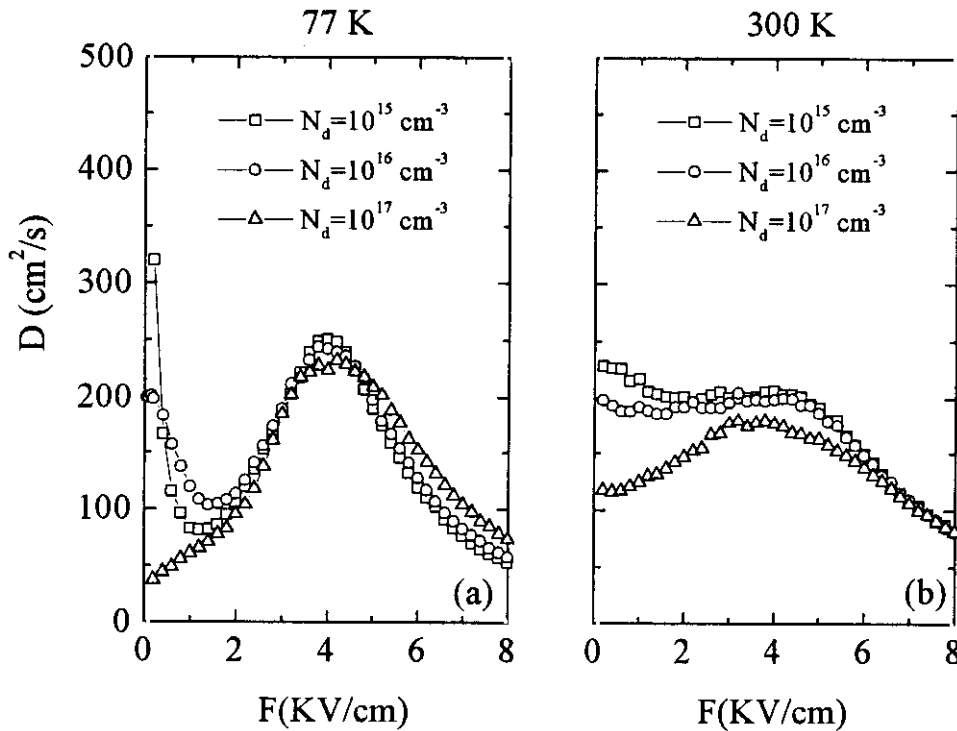


Figura 2.18. Coeficientes de difusión en condiciones alejadas del equilibrio a distintas temperaturas y dopados. Estimaciones realizadas con el método de Máxima Entropía.

consecuencia directa de la existencia de autocorrelaciones negativas, ya descrita anteriormente.

En los dopados mayores, el realce del ruido de partición se produce por una causa distinta: la existencia de impurezas ionizadas facilita la termalización de los portadores, haciendo que la función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad decaiga con más rapidez. La densidad espectral a las frecuencias más bajas (que alcanzan el rango de microondas) es esencialmente la integral de esta función; y por tanto la existencia de interacciones con impurezas ionizadas se traduce en una fuerte disminución del coeficiente de difusión. De hecho, a 300 K (figura 2.18b) el ruido de partición sólo se aprecia con claridad en el dopado más alto. No obstante, estos argumentos no se consideran suficientes para conciliar las importantes discrepancias encontradas entre distintos investigadores [57]-[62] respecto al comportamiento del coeficiente de difusión en condiciones alejadas del equilibrio.

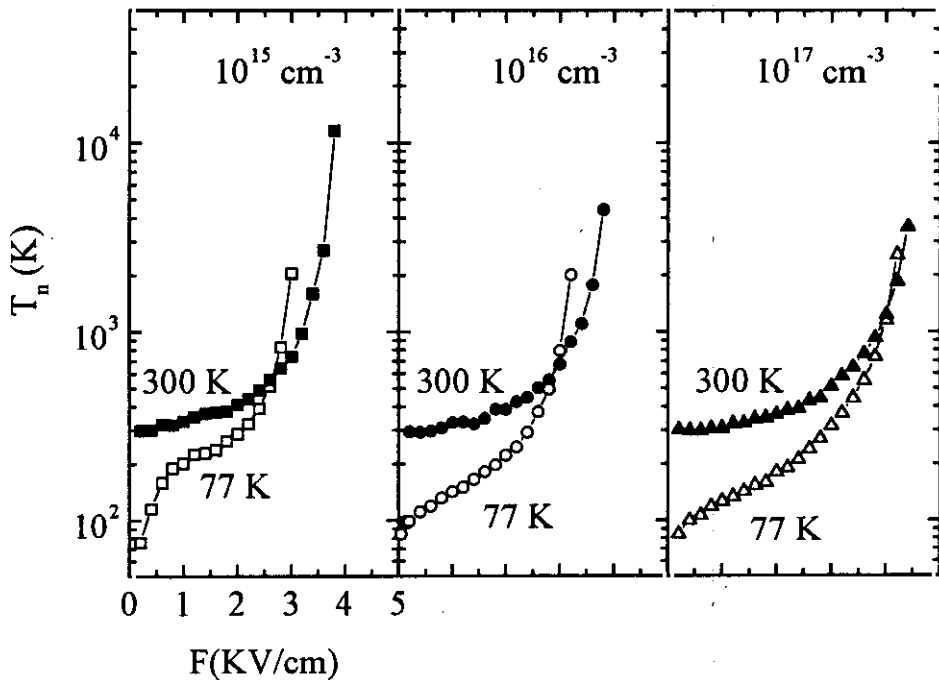


Figura 2.19. Temperatura de ruido simulada a 77 (símbolos blancos) y 300 K (símbolos negros).

La temperatura de ruido resultante se observa en la figura 2.19. En todos los casos existe un campo máximo a partir del cual la refrigeración del material incrementa la temperatura de ruido, lo cual es consistente con las curvas experimentales ya mostradas en las figuras 2.16 y 2.17. Este campo máximo aumenta con el dopado, hecho que es también consistente con la evolución del calentamiento de los electrones, el cual se hace menos acusado al aumentar la concentración de impurezas ionizadas.

Asimismo debe destacarse la diferencia, en términos cualitativos, entre las variaciones con el campo que experimentan las temperaturas de ruido calculadas a 77 y 300 K. En el primer caso puede apreciarse que el comportamiento de la temperatura de ruido a campos moderados y débiles presenta un escalón que es especialmente acusado en el dopado más bajo. Este comportamiento revela la eficacia de la emisión de fonones LO polares para contrarrestar el fuerte calentamiento que sufren los portadores en los campos más débiles; efecto que es enmascarado apreciablemente cuando existe una contribución importante de las impurezas ionizadas. Por otra parte la interacción con impurezas ionizadas en los campos más débiles contrarresta el calentamiento de los electrones, suavizando el incremento de la temperatura de ruido con el campo.

A 300 K la energía de los fonones ópticos polares es similar a la energía del portador en las inmediaciones del equilibrio, existiendo una elevada probabilidad de emisión incluso en los campos más débiles. Asimismo, la probabilidad de absorción de fonones es alta debido al mayor número de éstos, y por tanto existe un balance más equilibrado entre absorción y emisión; así como una termalización más rápida. En estas condiciones no se produce un calentamiento de portadores importante en los campos más débiles, y el incremento de la temperatura de ruido con el campo es menos acusado.

II.7 Conclusiones

La metodología seguida para obtener estimaciones espectrales de ruido ha sido ilustrada con los distintos ejemplos presentados en este capítulo. Después de ensayar los dos procedimientos propuestos en la bibliografía para calcular la función de autocorrelación, el uso de la transformada rápida y el algoritmo de Brunetti y Jacoboni, el primero ha demostrado ser considerablemente más eficiente, manteniendo al mismo tiempo un grado de precisión similar. Los tapers pueden mejorar notablemente una estimación espectral basada en el teorema de Wiener-Khintchine, especialmente los de Hann y Welch, si bien las diferencias encontradas entre unas funciones moduladoras y otras han resultado ser poco importantes.

Un aumento de la eficiencia del taper arrastra consigo errores en la estimación espectral que son difícilmente cuantificables. Estos errores se manifiestan especialmente en la zona de frecuencias más bajas, que abarca todas las bandas de señales de microondas. Así pues, la posibilidad de disponer de otra técnica de cálculos espectrales, el método de Máxima Entropía, permite mejorar la fiabilidad de las estimaciones.

La técnica de Máxima Entropía constituye una excelente alternativa para la obtención de espectros de ruido por el método de Monte Carlo. En este capítulo se ha ilustrado su eficiencia en la obtención de espectros con forma lorentziana. Estos espectros constituyen un importante ejemplo: abarcan la mayor parte de las aplicaciones prácticas en simulaciones de ruido de materiales homogéneos donde puede despreciarse la población de electrones en los valles satélites de la banda de conducción. En el resto de las aplicaciones el método de Máxima Entropía proporciona estimaciones con una eficiencia y una precisión aceptables, si bien su eficiencia es superada por las técnicas convencionales en aquellos casos en los que se produce un aumento del espectro en la zona de frecuencias bajas. En estas condiciones el método de Máxima Entropía exige un mayor número de polos para poder reproducir el espectro con precisión.

La comparación entre las estimaciones espectrales a 77 y 300 K con medidas de ruido han ilustrado la precisión que se puede obtener con el simulador en el cálculo de la temperatura de ruido y los coeficientes de difusión en condiciones alejadas del equilibrio. Las predicciones obtenidas en la simulación de la temperatura de ruido se consideran excelentes, y los coeficientes de difusión calculados a partir de la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad pueden reproducir con fidelidad curvas experimentales obtenidas en régimen estacionario. En este aspecto debe destacarse el importante papel que puede desempeñar la función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad para estimar distancias de termalización. En las referencias estudiadas se han encontrado fuertes discrepancias en las estimaciones y medidas de los coeficientes de difusión en régimen de no equilibrio. Es bien sabido que es preciso garantizar la uniformidad en el campo para poder caracterizar experimentalmente el comportamiento del material homogéneo, pero la necesidad de garantizar una termalización completa es igualmente importante, y no ha recibido suficiente atención en los trabajos experimentales que se han encontrado en la bibliografía.

CAPÍTULO III

SIMULACIÓN AUTOCONSISTENTE DEL MATERIAL DEGENERADO

III.1 Introducción

Las numerosas aproximaciones que es necesario realizar cuando se simula la dinámica de una partícula en un semiconductor altamente dopado no permiten vislumbrar con claridad la validez de cada una de ellas. Este hecho ha servido de base a una buena parte de la controversia encontrada en numerosos trabajos previos [63]-[71]. La mayor parte de las investigaciones sobre la simulación de movibilidades en semiconductores degenerados se ha centrado en mejorar los modelos de dispersión por impurezas ionizadas [63], [67]-[71]. También se han presentado refinamientos que dejaron de ser necesarios con el perfeccionamiento de las tecnologías de crecimiento epitaxial [66], así como complejos modelos restringidos a las inmediaciones del equilibrio que consideran interacciones simultáneas con más de una impureza [64], [65]. A pesar de estos trabajos, la simulación del material degenerado en condiciones alejadas del equilibrio es un tema de investigación que aún requiere esfuerzos adicionales.

Para simular cualquier contacto óhmico es necesario realizar una modelización precisa de los efectos de degeneración. Al establecer las condiciones de contorno en la modelización de un dispositivo es preciso hacer una hipótesis sobre la función de distribución en las inmediaciones del contacto, para saber qué velocidades deben asignarse a los portadores que se inyectan en el semiconductor. Dependiendo de la distribución que se seleccione, se pueden obtener configuraciones de campo eléctrico notablemente distintas [72], [73]. Son muy numerosos los ejemplos de simulaciones en los que esta limitación ha forzado el empleo de dopados moderados en los contactos óhmicos, con niveles de impurezas muy inferiores a los que se utilizan habitualmente en la fabricación de dispositivos [74]-[84]. De este modo es posible emplear funciones de distribución basadas en la estadística de Maxwell-Boltzmann para calcular las velocidades de los portadores que se inyectan en el material.

Por otra parte, la falta de precisión en la modelización del material degenerado puede afectar a la simulación de un dispositivo completo. Este es el caso de los diodos

Schottky de bajo ruido utilizados en aplicaciones de detección y mezclado de señales de microondas y submilimétricas. En estos dispositivos es necesario maximizar la concentración de impurezas con objeto de reducir en lo posible el ruido producido por el calentamiento de los electrones, lo que fuerza la utilización de capas epitaxiales degeneradas incluso en el contacto rectificante [85].

La primera parte de este capítulo esta dedicada a los refinamientos que se han tenido que hacer a los modelos usualmente utilizados en los simuladores de Monte Carlo para poder reproducir con una precisión razonable velocidades experimentales en condiciones de degeneración. Se ha centrado la atención fundamentalmente en dos efectos: el apantallamiento de la interacción con fonones y la interacción electrón-electrón de largo alcance. Asimismo se ha incluido el Principio de Exclusión de Pauli en la obtención del vector de onda después de cada dispersión. Este capítulo finaliza con un estudio de la influencia de estos refinamientos sobre las velocidades medias y las densidades espectrales de fluctuaciones de velocidad, que se ilustra mediante distintos casos prácticos. Las simulaciones de la temperatura de ruido se presentan en el capítulo siguiente, junto con los resultados experimentales.

III.2 El factor de apantallamiento

Para determinar el factor de apantallamiento es preciso hacer previamente una hipótesis sobre la función de distribución que adoptan los electrones. El caso del modelo de Brooks-Herring ilustra claramente este hecho, en donde se asume implícitamente que los electrones se distribuyen según la función de Maxwell-Boltzmann para resolver la ecuación de Poisson. Imponiendo esta distribución se obtiene el factor de apantallamiento clásico β_0 , dado por la expresión

$$\beta_0 = \sqrt{\frac{e^2 n}{\epsilon k_B T}} \quad (3.1)$$

Existen refinamientos a este modelo, en donde se utiliza una distribución de Fermi-Dirac en lugar de la de Maxwell-Boltzmann para obtener el hamiltoniano de perturbación asociado a la dispersión por impurezas ionizadas. En este caso se obtiene el factor de apantallamiento de Thomas-Fermi β , que es el que se ha utilizado en el simulador, y que viene dado por la expresión

$$\beta = \beta_0 \sqrt{\frac{F_{1/2}(E_F/k_B T)}{F_{1/2}(E_F/k_B T)}} \quad (3.2)$$

donde F_j son las integrales de Fermi-Dirac con la normalización de Dingle, definidas mediante la expresión

$$F_j(\eta) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{y^j}{1 + \exp(y - \eta)} dy \quad (3.3)$$

siendo Γ la función Gamma de Euler y η la energía de Fermi reducida,

$$\eta = \frac{E_F}{KT} \quad (3.4)$$

Las integrales de Fermi-Dirac han sido objeto de numerosas investigaciones debido a su gran importancia en física de semiconductores, y a la dificultad de implementar aproximaciones analíticas que permitan un cálculo eficiente de las mismas. Desgraciadamente esta dificultad es especialmente acusada para valores de dopado de gran interés, como son los comprendidos entre 10^{17} y 10^{18} cm^{-3} en GaAs a temperatura ambiente. Este rango de concentraciones está comprendido entre la zona de dopados bajos, donde no es necesario considerar las integrales, y la zona de alta degeneración, donde las integrales pueden aproximarse por exponenciales sin cometer errores apreciables. En la bibliografía estudiada se pueden encontrar tablas y aproximaciones analíticas de validez limitada a intervalos específicos [3]. En esta tesis

se ha utilizado para el cálculo de $F_{1/2}$ la aproximación analítica de Aymerich *et al.*, propuesta en la referencia [86] y recomendada como una de las más versátiles y eficientes en la recopilación de Blakemore [87]. La función $F_{-1/2}$ puede obtenerse a partir de $F_{1/2}$ haciendo uso de las propiedades básicas de estas integrales, es decir

$$\frac{dF_j(\eta)}{d\eta} = F_{j-1} \quad (3.5)$$

III.3 El método autoconsistente

Para poder utilizar el factor de apantallamiento en condiciones de no equilibrio es preciso utilizar en la ecuación 3.2 la temperatura de los electrones correspondiente a cada campo aplicado. Dado que la energía media no se conoce hasta el término de la simulación, es necesario emplear un método autoconsistente en el que se actualice periódicamente la temperatura de los electrones. Cada valle tiene asociado una energía media distinta, y por tanto es necesario calcular la temperatura en cada valle y después promediar utilizando los respectivos factores de peso estadístico, esto es

$$T_{el} = \frac{T_{el,\Gamma}t_{\Gamma} + T_{el,L}t_L + T_{el,X}t_X}{t_{\Gamma} + t_L + t_X} \quad (3.6)$$

siendo t_{Γ} , t_L , t_X los tiempos de permanencia del portador en los valles Γ , L y X , respectivamente, y $T_{el,\Gamma}$, $T_{el,L}$ y $T_{el,X}$ las respectivas temperaturas de los electrones.

El método utilizado en el simulador parte de la asignación de unos valores iniciales de la energía media y de la concentración de portadores. A continuación se especifica una temperatura de electrones inicial suponiendo una distribución de Fermi Dirac con una energía de Fermi efectiva para los portadores en el valle principal Γ , así como distribuciones de Maxwell-Boltzmann en los valles satélites L y X . Estas temperaturas vienen dadas respectivamente por

$$T_{el,\Gamma} = \frac{2E_{\Gamma}}{3k} \frac{F_{1/2}(\eta(T_{el,\Gamma}))}{F_{3/2}(\eta(T_{el,\Gamma}))}; \quad (3.7)$$

$$T_{el,L,X} = \frac{2E_{L,X}}{3k} \quad (3.8)$$

La integral de Fermi de orden 3/2 se ha calculado con la aproximación analítica de Aymerich *et al.*, también propuesta en la referencia [86].

La suposición de que los efectos de degeneración son despreciables en los valles satélites mejora notablemente la eficiencia del método para valores de campos elevados, y queda ampliamente justificada en el GaAs por la elevada masa efectiva que tienen los portadores en estos valles; así como por la existencia de multiples valles equivalentes (cuatro valles L y tres X), lo que amplía la densidad de estados disponibles para los portadores. Gracias a esta aproximación la temperatura de los electrones en los valles satélites se obtiene de forma inmediata a partir de las energías correspondientes. El valle principal es más problemático, pues requiere el cálculo de la energía de Fermi efectiva. La concentración de portadores en el valle Γ se ha obtenido mediante la aproximación [87]

$$n_{\Gamma} = \int_0^{\infty} f(E)g(E)dE \approx N_{\infty} \left[F_{1/2}(\eta) + \frac{15\alpha_{\Gamma}kT_{el,\Gamma}}{4E_g} F_{3/2}(\eta) \right] \quad (3.9)$$

siendo $g(E)$ la densidad de estados, en la que se ha incluido una aproximación de primer orden para contabilizar la no parabolicidad, E_g es la anchura del gap, α_{Γ} la constante de no parabolicidad en el valle principal y

$$N_{\infty} = 2 \left[\frac{2\pi m_n kT_{el,\Gamma}}{h^2} \right]^{3/2} \quad (3.10)$$

la densidad efectiva de estados en el valle Γ . La dependencia de E_g con la temperatura es bien conocida y se ha utilizado la expresión semiempírica propuesta por Blakemore en la referencia [88]. Para la obtención de la energía de Fermi reducida se ha utilizado la ecuación implícita de Nilsson [89],

$$\eta = \ln(u) + u[64 + 0.05524u(64 + \sqrt{u})]^{-1/4}; \quad (3.11)$$

siendo $u \equiv F_{1/2}(\eta)$.

La energía de Fermi depende de la temperatura de los electrones, y por tanto es preciso obtener ambos factores mediante una técnica iterativa a partir de la ecuación de Nilsson y la ecuación (3.7). La convergencia se consiguió sin problemas desarrollando una función error que se minimizó con el algoritmo de Powell, ya empleado para la optimización de los intervalos de energía; tal y como se ha descrito en el primer capítulo de esta tesis.

Una vez obtenida la temperatura de los electrones se actualiza el factor de apantallamiento y los mecanismos de dispersión que dependen de él, y finalmente se repite la optimización de los intervalos de energía en los cuales se discretiza la probabilidad total de dispersión para mantener la eficiencia.

III.4 Apantallamiento de fonones

La existencia de un número elevado de portadores libres en el cristal también da lugar al apantallamiento de la interacción con los fonones ópticos polares, así como de la interacción piezoeléctrica. El apantallamiento de éste último mecanismo ya ha sido estudiado, y la probabilidad de dispersión correspondiente que ha sido incluida en el simulador se ha tomado del modelo de Ridley [90]. La única modificación que se ha realizado a este modelo es la sustitución del factor de apantallamiento clásico en condiciones de equilibrio por el factor de Thomas-Fermi en condiciones de no equilibrio. Esta modificación se ha realizado para mantener una modelización coherente de los efectos de apantallamiento.

En las referencias estudiadas no se han encontrado expresiones analíticas explícitas para el cálculo de la probabilidad de dispersión por fonones ópticos polares apantallados, a pesar de que esta interacción es una de las más importantes en el GaAs. Debido a ello, el apéndice I describe cómo se ha obtenido un modelo analítico para este mecanismo, que es el empleado en el simulador.

La influencia del calentamiento de los electrones en los efectos de apantallamiento queda reflejada en la figura 3.1, en donde se ha calculado la probabilidad de dispersión por fonones ópticos polares para dos temperaturas de electrones distintas (300 y 600 K), y una temperatura de red de 300 K. Tal y como puede apreciarse, el calentamiento reduce ligeramente la efectividad de los efectos de

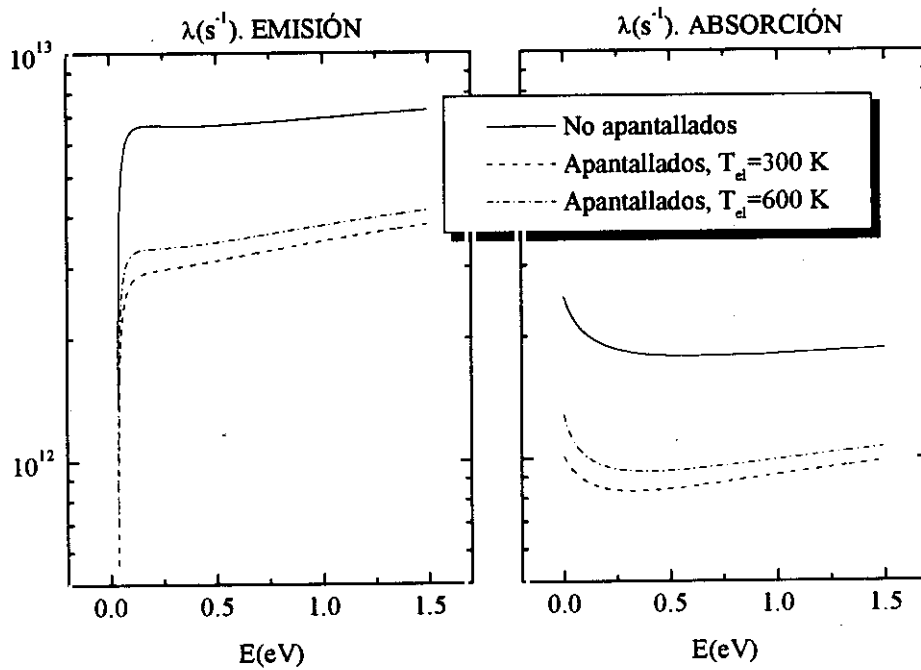


Figura 3.1. Influencia del calentamiento de los electrones en los efectos de apantallamiento de fonones ópticos polares, para una temperatura de 300 K. Concentración de portadores: $n_e = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

apantallamiento, manteniendo la misma dependencia con la energía.

III.5 La interacción electrón - electrón

La interacción electrón-electrón se manifiesta mediante dos tipos distintos de dispersión [91]. El primero de ellos consiste en las interacciones coulombianas de corto alcance, en las cuales el portador sufre la acción del campo generado por cada una de las cargas más próximas a él. El segundo representa la interacción con las oscilaciones colectivas de carga, que pueden ser simuladas mediante la emisión y absorción de una partícula ficticia cuya energía depende de la concentración de portadores. Esta partícula recibe el nombre de plasmón.

Los primeros intentos de incluir la interacción electrón-electrón de corto alcance se presentaron en simulaciones de una partícula [92], [93], pero posteriormente aparecieron procedimientos más precisos para incluir la interacción electrón-electrón completa en simuladores de múltiples partículas [94], [95]. No obstante, en todos estos trabajos se hicieron simplificaciones tan restrictivas que no se pudo realizar ninguna comparación con resultados experimentales, centrándose los esfuerzos en determinar esencialmente funciones de distribución.

Las técnicas empleadas para incluir la interacción de corto alcance en una simulación de múltiples partículas exigen un consumo de memoria y un tiempo de cálculo muy superior a los necesarios en la simulación de una sola partícula; y han sido cuestionadas recientemente en un trabajo sobre Si degenerado [96] por no considerar el principio de indistinguibilidad de la mecánica cuántica.

Por otra parte, la estadística de Fermi-Dirac está fuertemente arraigada en la modelización de semiconductores degenerados, y este hecho dificulta la posibilidad de conciliar las investigaciones sobre la interacción electrón-electrón con resultados clásicos en situaciones próximas al equilibrio: la estadística de Fermi-Dirac se asienta en la hipótesis básica de que las partículas no interaccionan entre sí. Asimismo, distintos trabajos revelan la escasa incidencia de la interacción electrón-electrón de corto alcance en las movilidades [95], [63]. De hecho, la sección eficaz de dispersión de este mecanismo disminuye al aumentar la concentración de electrones [63]. Así

pues, la interacción electrón-electrón de corto alcance no ha sido considerada en el simulador.

La situación es muy distinta en el caso de la interacción de largo alcance, pues la existencia de plasmones está ampliamente respaldada por evidencias experimentales. En GaAs, la importancia de la dispersión por plasmones adquiere importancia a partir de dopados superiores a $5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$.

Existen dos formas alternativas de simular la interacción electrón-plasmón. La primera de ellas consiste en considerar este efecto como un mecanismo adicional de dispersión, para el cual se han desarrollado modelos analíticos relativamente fáciles de implementar en el método de Monte Carlo [97]. La segunda alternativa se utiliza en simulaciones multipartícula, y consiste en resolver la ecuación de Poisson de forma consistente con la distribución de carga durante la simulación, actualizando el campo y la carga a intervalos de tiempo suficientemente cortos como para que se reproduzcan las interacciones de largo alcance que representan los plasmones [98], [99].

Sin embargo, para reproducir con precisión curvas experimentales de velocidad-campo en GaAs degenerado se ha comprobado que es preciso considerar no sólo la existencia de plasmones, sino también la de sus acoplos con las vibraciones de la red [100]. Este efecto ha comenzado a recibir atención en el ámbito de las simulaciones de Monte Carlo muy recientemente [100], [101]; a pesar de que distintos trabajos, tanto teóricos [102]-[104] como experimentales [105]-[109] han estado respaldando su existencia desde los últimos treinta años. Este hecho pone de manifiesto la dificultad de encontrar un modelo suficientemente simple y eficiente que pueda integrarse en un simulador de Monte Carlo.

Cuando hay una concentración elevada de portadores, los mecanismos convencionales de dispersión por plasmones y por fonones ópticos polares se convierten en mecanismos híbridos que son combinaciones de un fonón y un plasmón; y que pueden asociarse a sendas partículas cuyas energías dependen de la densidad de carga. Este acoplo es una consecuencia directa del hecho de que las energías de los fonones y de los plasmones alcanzan órdenes de magnitud similares [102].

Con objeto de estudiar la posible influencia que pudieran ejercer estos acoplos sobre la velocidad de la partícula, se ha incorporado en el simulador un modelo sencillo que aprovecha los resultados presentados por Peschke en la referencia [110]. La probabilidad de dispersión de cada modo híbrido puede expresarse como una combinación lineal de dos contribuciones independientes, cada una de las cuales da cuenta de la parte fonónica y plasmónica del modo. En el simulador desarrollado para esta tesis se han calculado las probabilidades de dispersión mediante una combinación lineal de la dispersión por fonones ópticos polares apantallados y la dispersión por plasmones puros propuesta por Lügli en la referencia [97]. El factor de proporcionalidad en cada mecanismo es el contenido de fonón del modo correspondiente, para el cual existen distintos modelos analíticos. El modelo de Kim, Das y Senturia proporciona expresiones analíticas explícitas para el contenido del fonón en cada uno de los modos híbridos, en función de la energía de las partículas asociadas a los mismos [102]. Estas expresiones han sido las adoptadas en el simulador.

La variación de la naturaleza de la partícula asociada al modo híbrido queda reflejada en las funciones de cálculo de las probabilidades de dispersión sólo cuando los dopados son altos. A dopados bajos el modo híbrido de alta energía se convierte en un fonón óptico polar y el de baja energía en un plasmón. Este último experimenta una reducción progresiva de su probabilidad correspondiente a medida que disminuye la concentración de portadores. Así pues, la sustitución de los modos híbridos por los mecanismos clásicos de dispersión por fonones ópticos polares y plasmones es consistente con los modelos convencionales de Monte Carlo, válidos para concentraciones bajas de portadores de carga. La figura 3.2 muestra las razones de dispersión calculadas para una temperatura de los electrones de 300 K. Los modos 1 y 2 corresponden a los de alta y baja energía, respectivamente.

Los hamiltonianos de perturbación de fonones y plasmones tienen un comportamiento similar. Sin embargo, los plasmones tienen un límite respecto al máximo vector de onda que pueden adquirir. Este límite da lugar a la aparición de restricciones adicionales impuestas al ángulo formado por los vectores de onda del

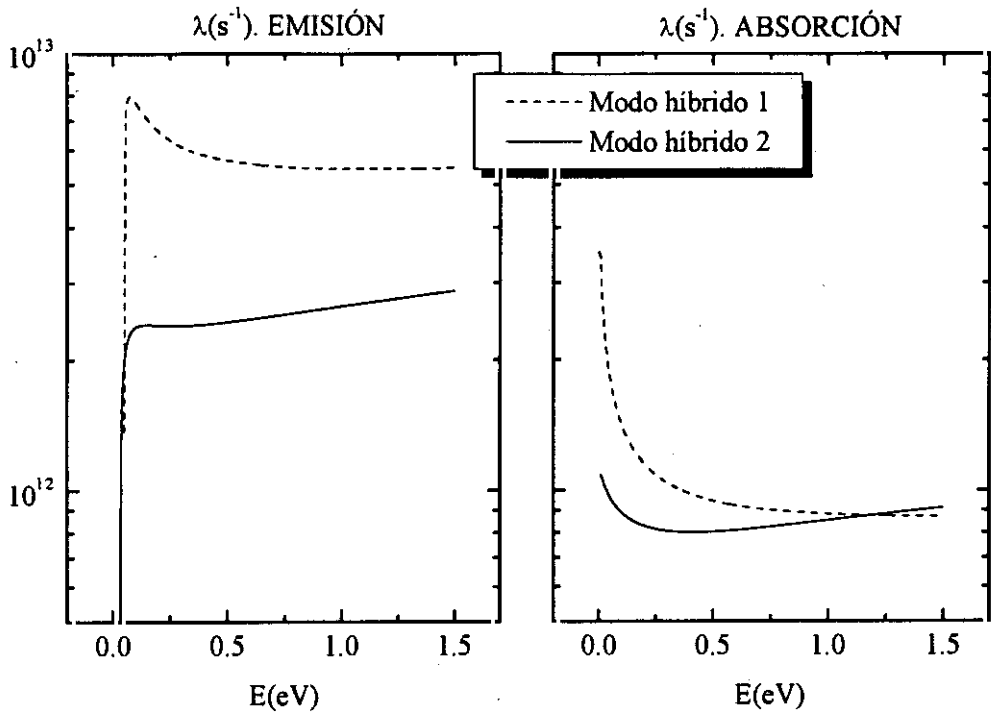


Figura 3.2. Probabilidades de dispersión por modos híbridos, para una temperatura de 300 K. Concentración de portadores: $n_e=10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

electrón antes y después de la dispersión, restricciones que han de tenerse en cuenta *únicamente* cuando la dispersión es originada por la parte plasmónica de cada modo híbrido. Para simular esta restricción se ha desarrollado un método inspirado en la técnica utilizada por Lugli y Ferry para considerar el Principio de Exclusión de Pauli en las probabilidades de dispersión [111]. El procedimiento propuesto parte de la generación de un número aleatorio uniformemente distribuido entre 0 y 1. Posteriormente se calcula el valor de la intensidad del fonón, según el modelo propuesto por Kim, Das y Senturia. Si esta intensidad supera al número aleatorio, el electrón se dispersa como si hubiera interactuado con un fonón; de lo contrario se considera que ha interactuado con un plasmón. En ambos casos se calcula el ángulo de dispersión según el modo desacoplado correspondiente.

Cuando se produce la interacción con la parte plasmónica del modo, se comprueba la diferencia entre el momento inicial y final del portador de carga, según

las leyes de conservación. Si esta diferencia supera al vector de onda de corte del modo correspondiente, el simulador actúa como si la dispersión no se hubiera producido; respetando el vector de onda y energía originales del portador. De esta forma quedan reflejadas las propiedades de corte de los modos híbridos sólo en la parte plasmónica de cada modo.

III.6 El Principio de Exclusión de Pauli

Cuando se calcula el vector de onda del portador inmediatamente después de haber sufrido cada dispersión, en las simulaciones convencionales se aplican las leyes de conservación del momento y la energía sin tener en cuenta que el estado final obtenido para el portador puede estar ya ocupado. Esta aproximación es válida cuando el material no está degenerado. Sin embargo, en condiciones de degeneración el Principio de Exclusión de Pauli adquiere una especial relevancia.

El Principio de Exclusión se ha incorporado en el simulador mediante un método similar al propuesto por Lugli y Ferry [111], que fue sugerido al autor a través de una comunicación personal [112]. En este método se mantienen las probabilidades de dispersión sin modificaciones, y una vez calculado el vector de onda después de cada dispersión se genera un número aleatorio que es comparado con la probabilidad de que el portador encuentre un estado desocupado. En caso de que el estado final esté desocupado, el simulador rechaza la dispersión y recupera el estado que tenía el portador inmediatamente antes de colisionar.

Para obtener la probabilidad de ocupación es necesario conocer la función de distribución, y por tanto el método autoconsistente descrito en el apartado III.3 no sólo es imprescindible para estimar los efectos de apantallamiento sino que sin él tampoco sería posible considerar el Principio de Exclusión.

III.7 Resultados de las simulaciones

Ejemplo 1. Simulaciones a 300 K

En este primer ejemplo se ilustrará la importancia de los refinamientos realizados mediante distintas simulaciones a temperatura ambiente. La figura 3.3 muestra las velocidades obtenidas por el autor a distintas concentraciones de impurezas N_d en condiciones de degeneración [100]. También se han incluido las curvas experimentales publicadas por Masselink en la referencia [113].

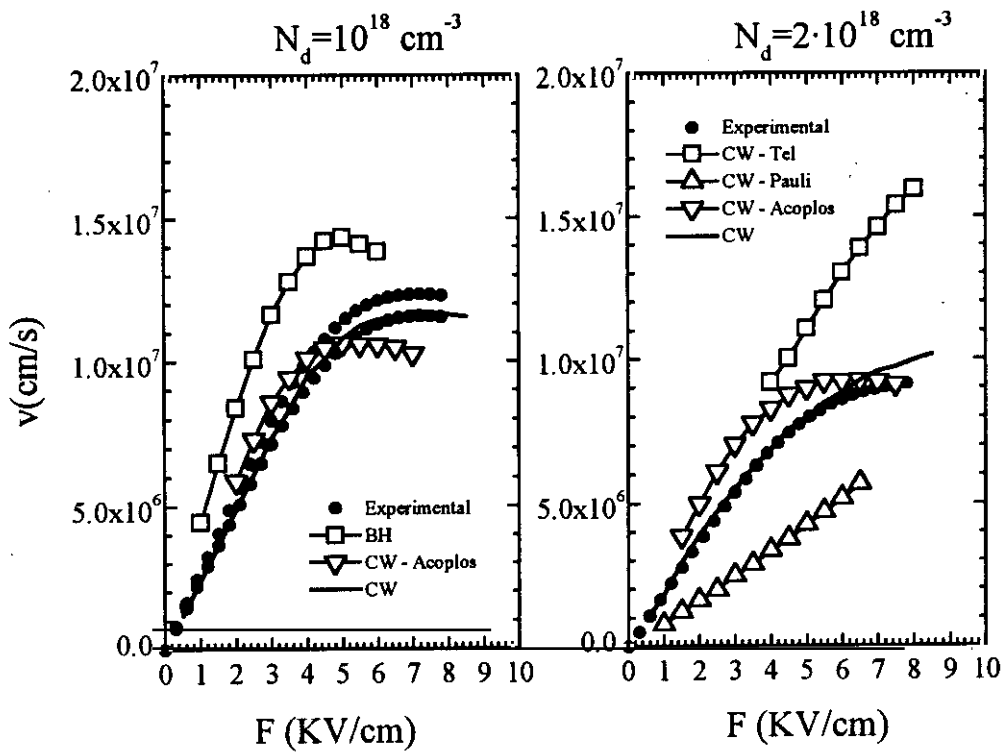


Figura 3.3. Velocidades simuladas a 300 K con distintos modelos, en comparación con las características experimentales de Masselink.

En la simulación identificada como "BH" se incluyeron todos los refinamientos descritos en este capítulo, es decir, apantallamiento en condiciones de no equilibrio, acoplos entre fonones ópticos polares y plasmones y el Principio de Exclusión. En la

dispersión por impurezas ionizadas se empleó el modelo de Brook-Herring, con el factor de apantallamiento de Thomas-Fermi a la temperatura de los electrones. La simulación "CW" es igual a la anterior en todos los aspectos salvo en la dispersión por impurezas ionizadas, para la cual se utilizó el modelo de Conwell-Weisskopf. La curva "CW - Acoplos" difiere de "CW" en que se sustituyó el modo híbrido 1 por la dispersión por fonones ópticos polares con efectos de apantallamiento dados por el factor de Thomas-Fermi a la temperatura de los electrones; y el modo híbrido 2 se sustituyó por la dispersión por plasmones. En "CW - Pauli" se realizó la misma simulación que en "CW", pero despreciando el Principio de Exclusión de Pauli. Finalmente, la curva "CW- T_{el} " difiere de la curva "CW" en que se despreció el calentamiento de los electrones en el cálculo del factor de Thomas-Fermi.

La primera conclusión destacada que se deriva de estas figuras es la sobreestimación de las velocidades que se obtiene con el modelo de Brooks-Herring, a pesar de las correcciones realizadas en el factor de apantallamiento. El valor de la velocidad máxima ($1.5 \cdot 10^7$ cm/s) que predice el modelo de Brooks-Herring no resulta ser excesivamente superior a la máxima velocidad obtenida en las curvas experimentales ($1.25 \cdot 10^7$ cm/s); pero el comportamiento cualitativo de esta curva simulada difiere del que se obtiene en las medidas, para las cuales la máxima velocidad se consigue a campos apreciablemente mayores.

Asimismo, la influencia del Principio de Exclusión en el cálculo de las velocidades es muy considerable, incluso a temperatura ambiente, para concentraciones de impurezas que se pueden considerar moderadas respecto a las comúnmente empleadas en la fabricación de contactos óhmicos. Cuando se desprecia el Principio de Exclusión (curva "CW-Pauli"), las velocidades calculadas son notablemente inferiores debido a que se sobreestima el número de dispersiones permitidas que sufren los portadores de carga. Únicamente el modelo más sofisticado de todos, con la inclusión de todos los efectos de degeneración, es capaz de reproducir, en todos los casos, las curvas v-F con una precisión comparable al grado de repetibilidad de las velocidades experimentales.

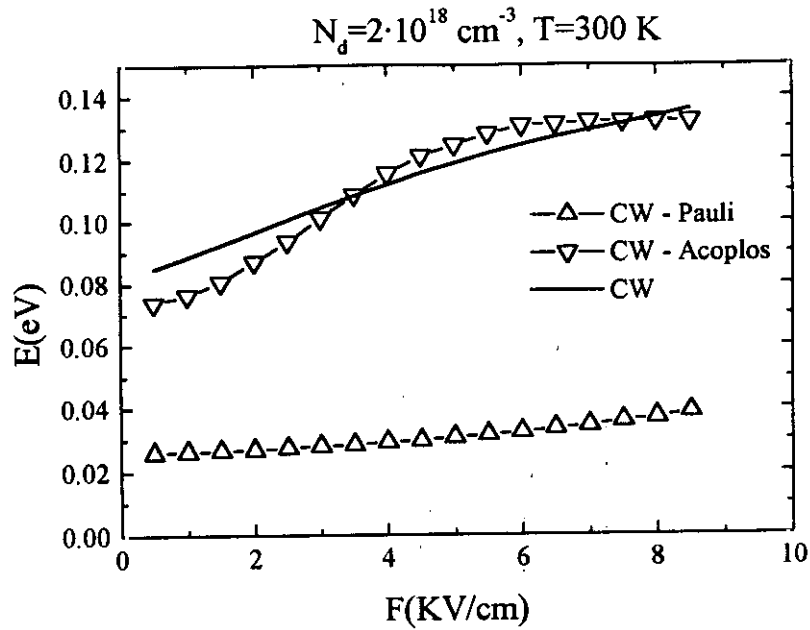


Figura 3.4. Efecto del Principio de Exclusión de Pauli y de los acoplos entre plasmones y fonones en la energía media.

Los refinamientos estudiados en este capítulo también se reflejan apreciablemente en otros parámetros de interés. La figura 3.4 muestra la energía media obtenida en las simulaciones "CW", "CW-Pauli" y "CW-Acoplos". El Principio de Exclusión fuerza a los portadores a ocupar niveles más altos de energía, haciendo que las simulaciones que consideran este principio obtengan unas energías medias en las inmediaciones del equilibrio que exceden notablemente el valor dado por el Principio de Equipartición maxwelliano, que es de 0.039 eV a 300 K. Por otra parte, la simulación que desprecia el Principio de Exclusión proporciona un valor sensiblemente inferior (0.025 eV), hecho que revela la pérdida de energía sufrida por los portadores en la creación de la parte plasmónica de los modos híbridos.

La figura 3.4 también muestra la suavización experimentada por la característica E-F como consecuencia de los acoplos entre los plasmones y los fonones. Esta suavización es consistente con las curvas v-F mostradas en la figura 3.3. Cuando se desprecian los acoplos se produce una sobreestimación de la energía

justamente en el rango de campos en el que se alcanza la saturación de la velocidad. Esta sobreestimación da lugar a la existencia de una zona de movilidad diferencial negativa con campos umbrales similares a los que se encuentran en los materiales no degenerados, hecho que contradice claramente las curvas experimentales. La zona de movilidades negativas existe; pero los campos umbrales son apreciablemente mayores y fuertemente dependientes de la concentración de impurezas.

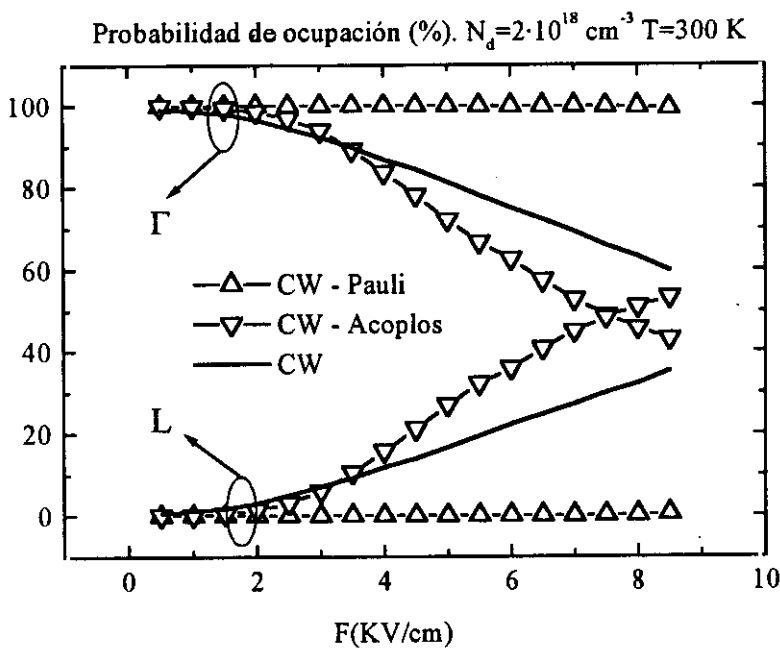


Figura 3.5. Efecto del Principio de Exclusión de Pauli y de los acoplos entre plasmones y fonones en la ocupación de los valles satélite L.

Las probabilidades de ocupación de los valles satélites también sufren modificaciones apreciables. La figura 3.5 así lo confirma, en donde se han representado las probabilidades de localizar un electrón en los valles Γ y L calculadas a partir de los tiempos en los que la partícula se encuentra en cada valle. La existencia de acoplos da lugar a que la ocupación de los valles satélites sea más reducida para los campos elevados, pero mayor para los más débiles. Por otra parte, al despreciar el Principio de Exclusión de Pauli se sobreestima considerablemente la población de

portadores en el valle principal. De hecho, podrían encontrarse concentraciones de impurezas a las cuales la compensación de errores producida al despreciar ambos efectos (Principio de Exclusión y acoplos) podría dar mejores estimaciones de la distribución de portadores entre los valles que la simulación que considerase tan sólo uno de los dos efectos.

La figura 3.6 muestra la influencia del acoplo de los fonones y los plasmones en la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad para campos débiles. La técnica utilizada en la estimación espectral es la de Máxima Entropía. La influencia de los acoplos es mínima para una concentración de electrones de 10^{18} cm^{-3} (figura 3.6a). Sin embargo, su importancia se hace evidente al duplicar este valor (figura 3.6b), que aún puede considerarse moderado comparado con las concentraciones de impurezas

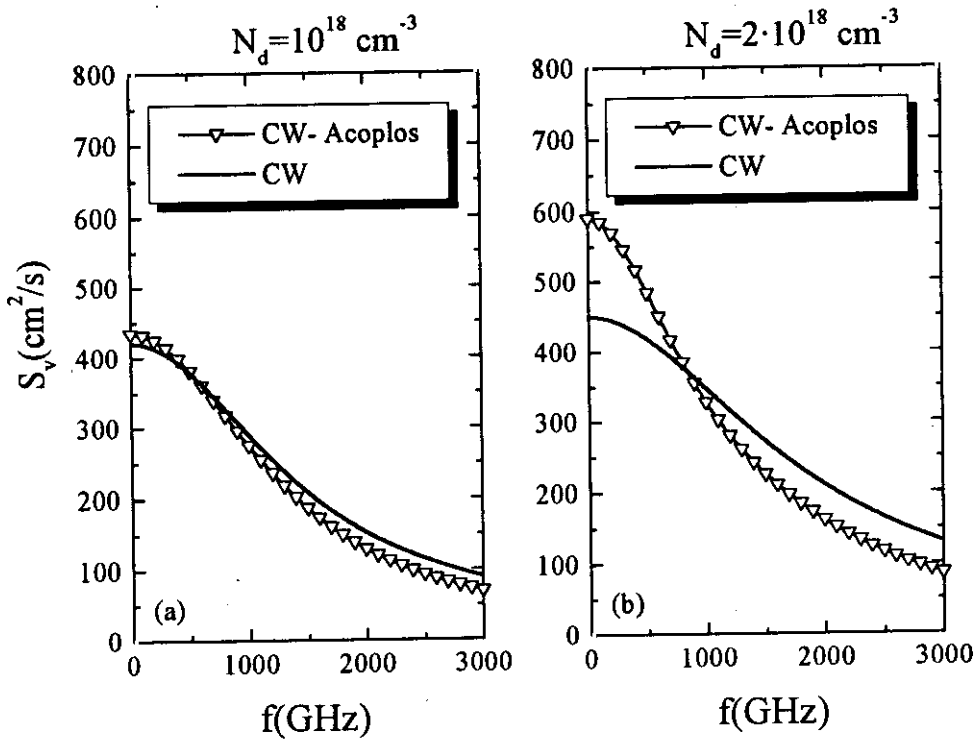


Figura 3.6. Densidad espectral de fluctuaciones de velocidad a 300 K. Campo aplicado: 0.5 KV/cm.

habitualmente utilizadas en contactos óhmicos. Asimismo, la sensibilidad con la

concentración de electrones es considerablemente menor cuando se consideran los acoplos. El efecto producido por la interacción con los plasmones compensa el aumento de colisiones debido al incremento de la concentración de impurezas, haciendo que la densidad espectral aumente con el dopado. Sin embargo, la existencia de los acoplos suaviza esta compensación, de forma que el espectro finalmente obtenido varía muy débilmente con el dopado.

Por otra parte, la simulación para el dopado más alto revela un decaimiento más lento de la densidad espectral obtenida con los modos híbridos. Un decaimiento lento del espectro está ligado a un decaimiento rápido de la función de autocorrelación; y por tanto cuando se desprecian los modos híbridos se obtiene una termalización de portadores más lenta.

En el capítulo anterior las simulaciones en materiales no degenerados

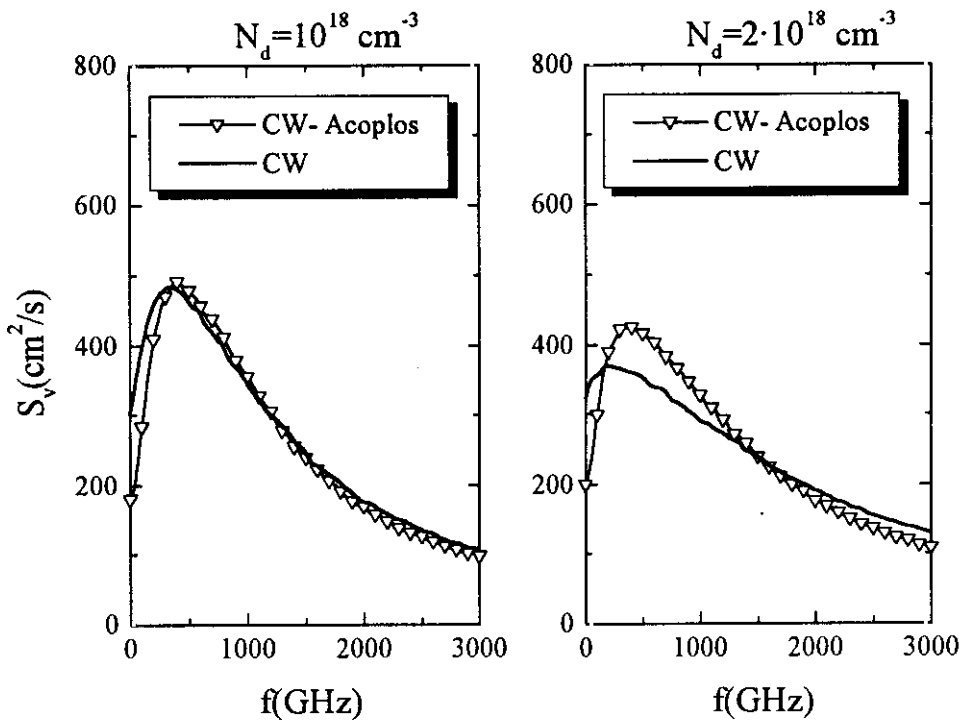


Figura 3.7a. Efecto de los acoplos entre plasmones y fonones en la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad a 300 K. Campo aplicado: 10 KV/cm.

revelaron una menor eficiencia del método de Máxima Entropía en estimaciones

espectrales no lorentzianas, y por tanto la simulación del espectro para este primer ejemplo correspondiente a valores elevados de campo se realiza con la técnica convencional basada en el teorema de Wiener-Khintchine. El resultado de esta simulación se ilustra en la figura 3.7a, donde se representan los espectros calculados para un campo de 10 KV/cm. En este caso, la simulación "CW" muestra una mayor sensibilidad con la concentración de electrones. Por otra parte, tal y como puede observarse comparando esta simulación con la curva "CW-Acoplos", la existencia de acoplos acerca el máximo del espectro a la zona de frecuencias más bajas, haciéndolo más parecido a una función lorentziana. Estos efectos son consecuencia directa de la menor población de electrones en los valles satélite L.

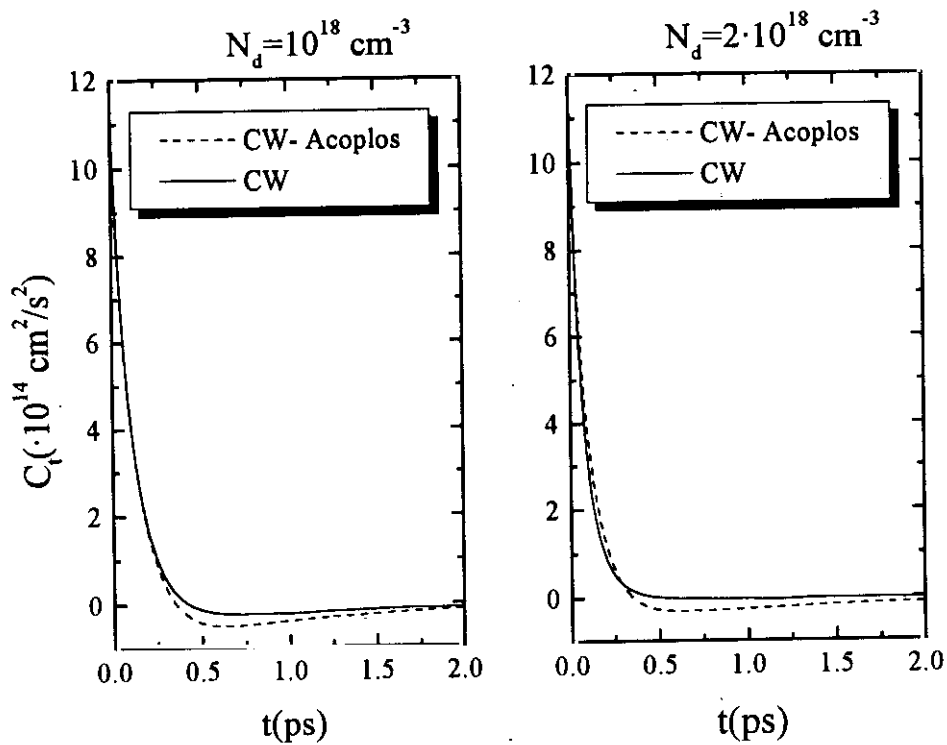


Figura 3.7b. Funciones de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad a 300 K correspondientes a los espectros de la figura 3.7a.

La incidencia en la función de autocorrelación también es apreciable, tal y como se observa en la figura 3.7b. La existencia de acoplos facilita una termalización de los portadores más rápida, al igual que como ocurre en los campos más débiles. En cualquier caso, el decaimiento de la función de autocorrelación es considerablemente más rápido que el observado en materiales no dopados.

Ejemplo 2. Simulaciones a otras temperaturas

La figura 3.8 muestra una comparación entre la velocidades simuladas y las curvas experimentales de Masselink medidas a 77 K. Al igual que en las simulaciones a 300 K, cuando se desprecian los acoplos entre los fonones y los plasmones nuevamente se alcanza la velocidad máxima a campos inferiores y prácticamente independientes de la concentración de electrones. En estas temperaturas las discrepancias con las medidas a campos más elevados son mayores que a 300 K, pero

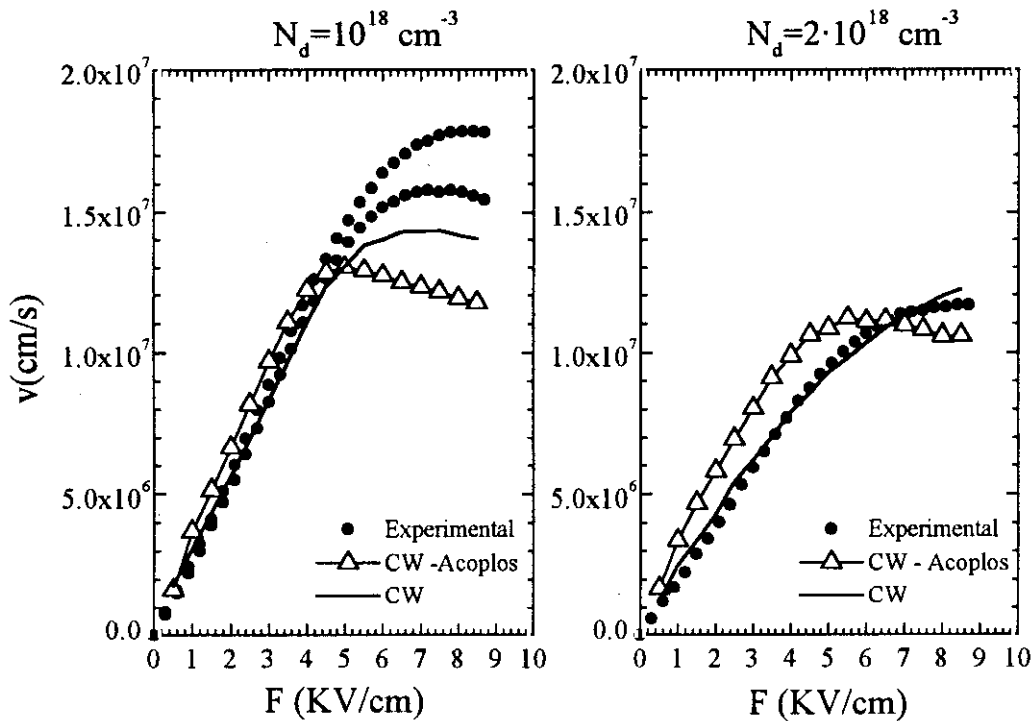


Figura 3.8. Velocidades simuladas a 77 K, en comparación con las curvas experimentales de Masselink.

las medidas con la muestra dopada a 10^{18} cm^{-3} revelan que también es mayor la falta de repetibilidad en el experimento. Así pues, se considera que la simulación con los modos híbridos es capaz de predecir con una precisión razonable las curvas experimentales a 77 K.

La figura 3.9 muestra las densidades espectrales obtenidas para distintas temperaturas. Las simulaciones de 0.5 KV/cm se realizaron con la técnica de Máxima Entropía, y las de 10 KV/cm con la técnica convencional. Los resultados en estas temperaturas nuevamente reflejan que cuando los campos son débiles no existen fuertes dependencias del espectro con respecto a la densidad de portadores. No obstante, el espectro se ensancha sistemáticamente al aumentar la concentración de

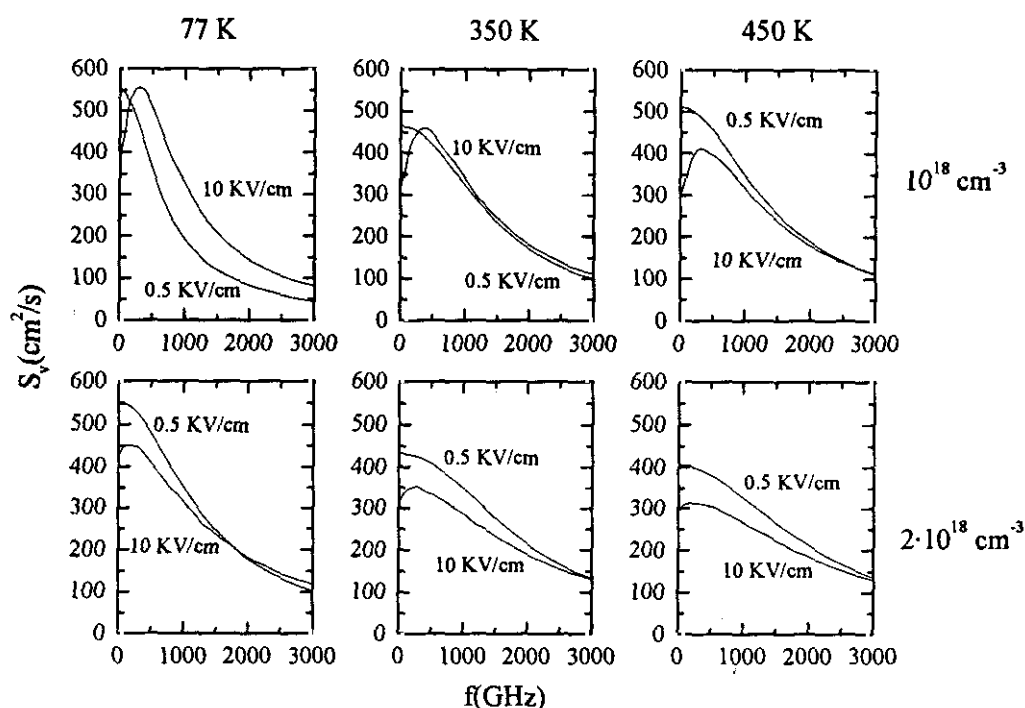


Figura 3.9. Densidad espectral calculada con todos los efectos de degeneración incluidos.

electrones, hecho que se verifica tanto a campos elevados como a los más débiles. Asimismo, también se puede apreciar el acercamiento a la función lorentziana por

parte de los espectros correspondientes a campos elevados, hecho que concuerda con las simulaciones a 300 K. La pérdida de energía en el valle principal es más significativa cuando la densidad de electrones es mayor, lo que explica la obtención del máximo a frecuencias que disminuyen sistemáticamente al aumentar la concentración de portadores, independientemente de la temperatura a la que se encuentre el material.

Ejemplo 3. El gas de electrones 3D

El gas de electrones tridimensional (3D) puede simularse como un material homogéneo en el que se han considerado todos los efectos de degeneración a excepción de la dispersión por impurezas ionizadas. La similitud existente entre las movilidades de un gas de electrones bidimensional en AlGaAs/GaAs y el gas homogéneo en materiales no dopados es bien conocida [113]-[119]. Por otra parte, las propiedades del gas 3D permiten delimitar con más claridad la influencia que ejerce la interacción por modos híbridos en el ruido. Distintos trabajos experimentales revelan que cuando se obtiene un buen aislamiento entre las impurezas ionizadas y el canal por el que circulan los portadores de carga, las movilidades de los gases de electrones bidimensionales en estructuras de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ son típicamente del orden de $7000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ a 300 K [113]-[115]. Este valor resulta ser ligeramente inferior a la movilidad del GaAs no dopado y presenta una dependencia escasa del tipo de confinamiento cuántico al que se somete el gas. En las referencias estudiadas se han encontrado medidas de movilidades de bajo campo en distintos HEMT's sin puerta basados en pozos cuánticos cuadrados que también son de $7000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [120].

La figura 3.10 muestra una comparación entre las velocidades que se han calculado para distintas concentraciones de electrones, junto con curvas experimentales en estructuras AlGaAs/GaAs [113]. Un ajuste de la concentración de electrones del gas 3D a las curvas de gases 2D permite obtener un buen acuerdo entre simulación y medidas que abarca toda la zona de electrones calientes, hasta un campo de aproximadamente 2 KV/cm .

La desviación del comportamiento del material homogéneo a campos elevados se produce fundamentalmente porque los portadores de carga adquieren energía

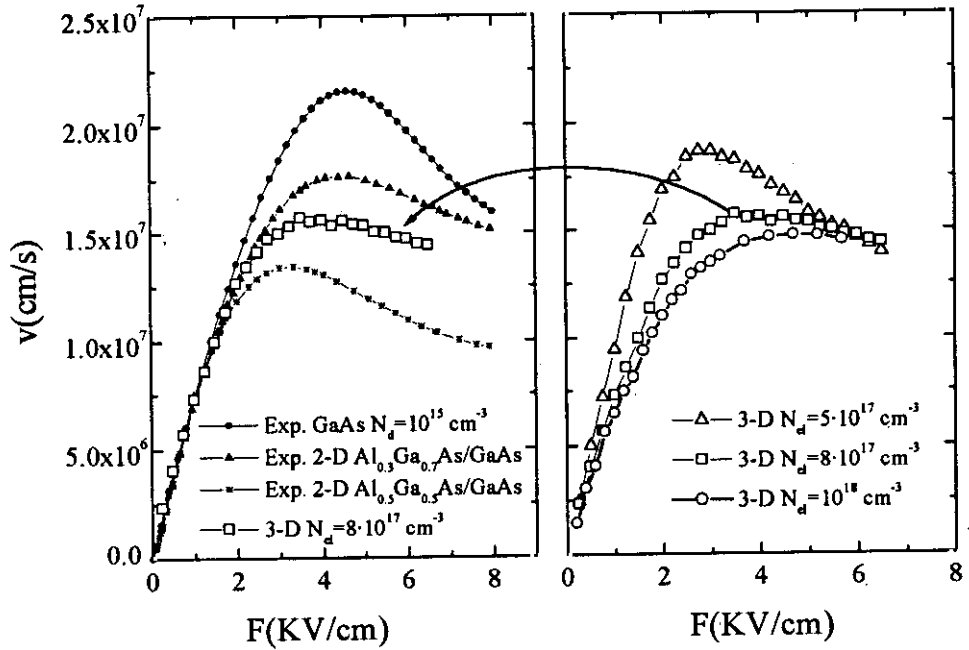


Figura 3.10. Velocidades simuladas para el gas de electrones 3D en comparación con las medidas en gases bidimensionales. También se muestra la curva v - F del material homogéneo débilmente dopado.

suficiente para superar la barrera de potencial que les confina, dando lugar a una transferencia importante de electrones al compuesto ternario. Asimismo, el confinamiento cuántico altera las diferencias de energías entre los valles no equivalentes.

La figura 3.11 muestra la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad calculada con todos los efectos de degeneración. El hecho más destacado que se observa en las simulaciones es la disminución sistemática de la densidad espectral a bajas frecuencias cuando aumenta la temperatura. Este comportamiento es el opuesto al que se ha observado en los materiales no degenerados, y fue parcialmente enmascarado por la interacción por impurezas en los degenerados. Asimismo, la

ausencia de impurezas ionizadas da lugar a un aumento de la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad respecto al comportamiento del material homogéneo mostrado en la figura 3.9. Este incremento es especialmente acusado a 77 K en el campo y dopado más débiles, donde la densidad espectral en el origen es más de

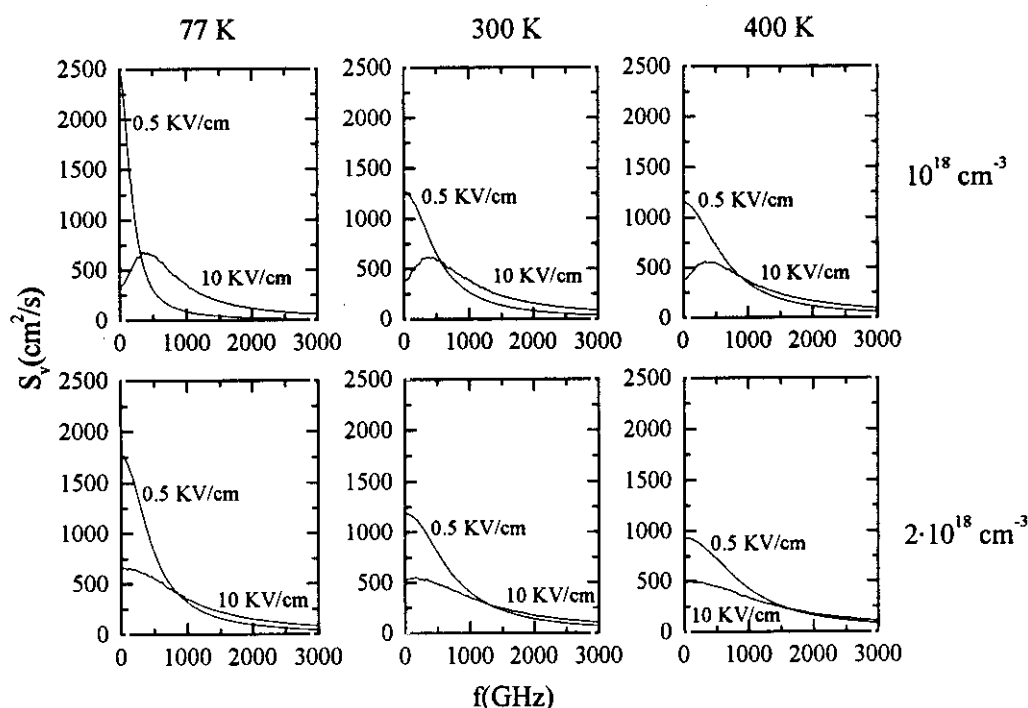


Figura 3.11. Densidad espectral de un gas de electrones 3D calculada con todos los efectos de degeneración incluidos.

cuatro veces superior al valor que tenía en el material dopado. A temperaturas y campos elevados el comportamiento del gas 3D es considerablemente más similar al del material, lo cual es consistente con el hecho bien conocido de que la interacción con impurezas ionizadas es más fuerte a campos débiles y temperaturas bajas.

A pesar de que las simulaciones 3D permiten obtener con precisión las velocidades medias en un amplio margen de campos aplicados, el confinamiento cuántico en la dirección transversal a la de propagación es determinante sobre los

coeficientes de difusión de los portadores. Por tanto, no es posible realizar una comparación directa entre la temperatura de ruido del gas 3D y el gas 2D confinado [118].

III.8 Conclusiones

Este capítulo ha ilustrado las sustanciales diferencias existentes entre la simulación del material no degenerado y el degenerado. En este último la existencia de una concentración elevada de portadores fuerza la implementación de un método autoconsistente en el que debe actualizarse periódicamente la función de distribución y la temperatura de los electrones. Por otra parte, la inclusión de los efectos de apantallamiento en condiciones de no equilibrio ha demostrado ser considerablemente importante para poder reproducir velocidades experimentales con precisión.

El simulador desarrollado para esta tesis ha incorporado un procedimiento original para incluir los efectos de los acoplos entre fonones y plasmones, gracias a lo cual el modelo físico del material que se ha empleado en la simulación es consistente con trabajos tanto teóricos como experimentales que se han encontrado en la bibliografía citada.

El resultado de utilizar modos híbridos en lugar de los mecanismos convencionales de interacción con fonones ópticos polares y plasmones marca diferencias en las características v - F , para dopados que incluso pueden considerarse moderados en un contacto óhmico convencional. Los modos híbridos causan un aumento en el campo eléctrico para el cual se obtiene la velocidad máxima, suavizando la variación de la energía de los portadores con respecto al campo y reduciendo la ocupación de los valles satélites.

La comparación directa de los resultados de la simulación con distintas características v - F experimentales revela que el modelo físico empleado es capaz de reproducir con una precisión razonable las velocidades medias en condiciones de degeneración.

La falta de resultados experimentales en el material degenerado impide verificar los valores obtenidos para la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad. Por otra parte, el valor de espectro en el origen no permite calcular directamente el coeficiente de difusión en el material degenerado; tal y como se hizo en el capítulo anterior. No obstante, la validez de las técnicas espectrales utilizadas en el simulador ya ha sido probada con los ejemplos dedicados al material débilmente dopado, y la comparación de las velocidades simuladas con las experimentales permite suponer que la física del material se ha modelizado con un grado de precisión razonable. Por otra parte los espectros obtenidos son consistentes con la variación de las velocidades medias con el campo, pues tal y como se ha ilustrado en los ejemplos de este capítulo, la existencia de acoplos se refleja en un comportamiento más lorentziano del espectro y una termalización más rápida. Ambos efectos son consecuencia directa de la menor población de electrones en los valles satélites.

CAPITULO IV

MEDIDAS DE RUIDO A FRECUENCIA DE MICROONDAS

IV.1 Introducción

La medición de la temperatura de ruido en un dispositivo de una puerta presenta la dificultad de que el dispositivo no proporciona ninguna ganancia de señal [121], [122]. Este problema hace que las medidas en una puerta requieran un sistema experimental con una temperatura de ruido más baja que las habitualmente encontradas en los sistemas de medida de dispositivos de dos puertas, como los transistores o amplificadores [123]-[126]. Asimismo, una medición precisa exige realizar una calibración que permita identificar y eliminar la influencia de todos los componentes del sistema. Esta influencia se manifiesta mediante dos contribuciones fundamentales: las múltiples reflexiones existentes en cada discontinuidad del sistema y la potencia de ruido añadida por cada componente disipativo.

Los medidores de ruido están específicamente diseñados para dispositivos de dos puertas, y por tanto para caracterizar el ruido en un dispositivo de una puerta es necesario utilizar las potencias detectadas en lugar de la temperatura de ruido indicada directamente por el instrumento. Sin embargo, tal y como se ilustrará en este capítulo, es posible aprovechar las facilidades de calibración aportadas por el medidor para caracterizar dispositivos de una puerta.

El sistema experimental que se describe en esta tesis ha permitido caracterizar no sólo semiconductores homogéneos sino también distintos dispositivos, entre los que se incluyen canales de transistores HEMT [127], diodos Schottky submicrométricos para aplicaciones de mezclado [128], [129], dispositivos de heterounión (HBVs) para aplicaciones de multiplicación a frecuencias submilimétricas [130], y gases de electrones 2-D de AlGaAs/GaAs [131].

En los apartados IV.2 y IV.3 se explica el método de medida desarrollado y la técnica de calibración, analizándose las características de los distintos componentes que forman parte del sistema experimental. La importancia de acoplar el dispositivo al sistema de medida se ilustrará en el apartado IV.4. Para comparar los resultados de la simulación con las medidas de ruido no pulsadas que se presentan en este capítulo es necesario estimar la temperatura física alcanzada por las muestras, y a este fin se ha

dedicado el apartado IV.5. Los resultados obtenidos en IV.3 y IV.4 han servido de guía para realizar las medidas de muestras altamente degeneradas, que se presentan junto con las simulaciones al final de este capítulo.

IV.2 Medición del ruido en dispositivos de una puerta

La figura 4.1 muestra un esquema del montaje utilizado para las medidas de ruido. Este montaje está inspirado en el método del circulador [132], que es ampliamente utilizado para la caracterización de dispositivos Schottky [133], [134]. El uso de distintas cargas patrón con conmutadores para suministrar ruido al sistema durante la calibración permite realizar montajes alternativos [135]-[137]. Los conmutadores ofrecen la posibilidad de utilizar más de una carga patrón, gracias a lo cual se obtienen ecuaciones redundantes en el proceso de calibrado que permiten mejorar la precisión [138]. No obstante, el uso de conmutadores no permite realizar una calibración que elimine completamente la contribución de los mismos al ruido.

El método desarrollado y utilizado en esta tesis ofrece el principal aliciente de que no necesita medidas adicionales del coeficiente de reflexión. Para obtener la temperatura de ruido tan sólo es necesario conocer el módulo del coeficiente de reflexión; y éste, tal y como se verá a continuación, puede estimarse directamente a partir de la potencia de ruido. Recientemente se ha propuesto un nuevo método que tampoco necesita conmutadores, en el que se realiza simultáneamente la conexión del radiómetro, la carga patrón, el dispositivo a caracterizar y la fuente de ruido mediante un acoplador direccional [139], [140]. El acoplador direccional atenúa la potencia de ruido que llega al radiómetro, pero el método tiene la ventaja de que permite obtener también la fase del coeficiente de reflexión.

Para determinar la temperatura de ruido del dispositivo se considerarán las potencias de ruido normalizadas a la potencia que suministra una carga acoplada a la temperatura de referencia estándar de 290 K. Esta normalización es la utilizada por el instrumento [141]. Las potencias suministradas a la salida del dispositivo son

$$P_{C,H}^I = P_{C,H} |\Gamma_{DUT}|^2 + P_{DUT} (1 - |\Gamma_{DUT}|^2) \quad (4.1)$$

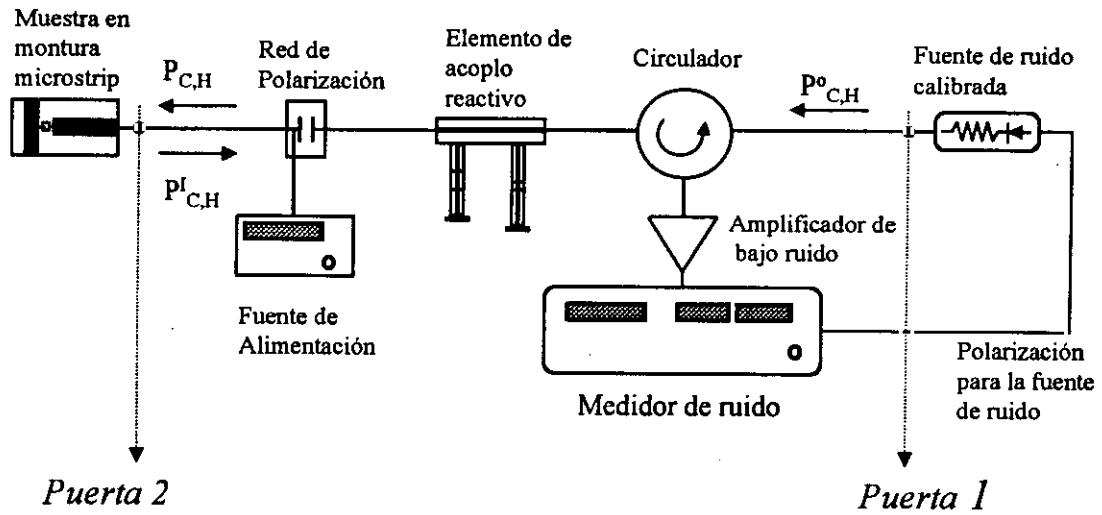


Figura 4.1. Sistema utilizado en la medición de la temperatura de ruido de dispositivos de una puerta.

donde los subíndices C y H representan los estados frío y caliente de la fuente patrón, respectivamente, y $|\Gamma_{DUT}|$ es el coeficiente de reflexión del dispositivo. P_{DUT} es la potencia de ruido generada por el dispositivo, la cual permite obtener la temperatura de ruido del mismo a partir de la relación

$$T_N = T_O P_{DUT} \quad (4.2)$$

siendo T_O la temperatura de referencia estándar de 290 K.

La fuente de ruido empleada en las medidas consiste básicamente en un diodo de avalancha con una atenuador a su entrada. La polarización del diodo está controlada por el propio medidor de ruido y permite activar la fuente en dos estados distintos C y H, a los que corresponde la emisión de las dos potencias de ruido P_C^o y P_H^o . El estado frío se obtiene manteniendo la fuente en equilibrio; y por tanto la temperatura de ruido asociada a este estado, T_C , coincide con la temperatura física de la fuente. Para obtener el estado caliente el medidor de ruido aplica una tensión de 28 V al diodo. El coeficiente de reflexión a la entrada del diodo varía considerablemente

en función de su polarización, pero el atenuador facilita la emisión de la potencia de ruido sin que existan reflexiones importantes en la puerta 1. Gracias a ello puede considerarse que la fuente está acoplada en sus dos estados; y por tanto las potencias de ruido disponibles a la salida de la fuente coinciden con las generadas, dadas por

$$P_C^0 = \frac{T_C}{T_0} \quad (4.3a)$$

$$P_H^0 = \frac{T_H}{T_0} \quad (4.3b)$$

siendo T_H la temperatura ruido del estado caliente.

El coeficiente de reflexión a la entrada del dispositivo se puede obtener de dos formas distintas. En la primera de ellas realiza una medida adicional con una analizador de redes, mientras que en la segunda se emplean directamente las medidas de ruido. Combinando las expresiones (4.1) y (4.2) se obtendría el cuadrado del coeficiente de reflexión ρ , dado por

$$\rho \equiv |\Gamma_{DUT}|^2 = \frac{P_H^I - P_C^I}{P_H - P_C} = \frac{\Delta P^I}{\Delta P} \quad (4.4)$$

Si la carga no es totalmente reflectiva, la temperatura de ruido se puede obtener sustituyendo la ecuación (4.1) en la (4.2) para cualquiera de los dos estados de la fuente. Utilizando el estado frío se obtiene

$$T_N = T_0 \frac{P_C^I - P_C \rho}{1 - \rho} \quad (4.5)$$

Las potencias de ruido suministradas al dispositivo son

$$P_C = \frac{(P_C^0 + kT_{A12B})}{kT_0} A_{12B} = \frac{T_C + T_{A12B}}{T_0} A_{12B} \quad (4.6a)$$

$$P_H = \frac{T_H + T_{A12B}}{T_O} A_{12B} \quad (4.6b)$$

donde A_{12B} es el factor de pérdidas entre las puertas 1 y 2 respectivamente; y T_{A12B} es la temperatura de ruido asociada al circulator [142] y la red de polarización, que viene dada por

$$T_{A12B} = T_R \left(\frac{1}{A_{12B}} - 1 \right) \quad (4.7)$$

siendo T_R la temperatura física del circulator. Puesto que tanto el circulator como la fuente se encuentran a la misma temperatura física, la sustitución de la ecuación (4.7) en (4.6a) y (4.6b) da lugar a las siguientes expresiones:

$$P_C = \frac{T_C}{T_O} \quad (4.8)$$

$$P_H = \frac{(T_H - T_C)A_{12B} + T_C}{T_O} = \frac{\Delta T A_{12B} + T_C}{T_O} \quad (4.9)$$

Finalmente, sustituyendo (4.8) en (4.5) se obtiene

$$T_N = \frac{P_C^I T_O - T_C \rho}{1 - \rho}; \quad (4.10)$$

que junto con la ecuación (4.4) permite determinar ρ a partir de la expresión

$$\rho = \frac{T_O \Delta P^I}{A_{12B} \Delta T} \quad (4.11)$$

El fabricante de la fuente proporciona los datos de calibración a partir del factor ENR, que se define como

$$\text{ENR} = 10 \log \frac{T_H - T_O}{T_O} \quad (4.12)$$

lo cual permite determinar el valor de la temperatura de ruido en el estado caliente.

Si se utilizase un sistema convencional de radiometría, P_C^I y P_H^I deberían ser estimados a partir de la potencia detectada por el instrumento. Sin embargo, el medidor de ruido utilizado ofrece la ventaja de ser capaz de suministrar estas potencias a partir de una calibración automática, en la cual tanto la ganancia disponible como la temperatura de ruido del sistema de medida se obtienen internamente mediante el microprocesador del instrumento. Gracias a esta peculiaridad pueden utilizarse las ecuaciones (4.10) y (4.11) directamente para determinar la temperatura de ruido y el coeficiente de reflexión del dispositivo.

Para realizar la calibración se pueden emplear dos procedimientos alternativos: el primero consiste en sustituir el dispositivo por una carga patrón que genere un coeficiente de reflexión igual a la unidad, como un cortocircuito o un circuito abierto. Después de enviar al medidor la instrucción de calibrar, se vuelve a conectar el dispositivo en lugar de la carga patrón. En estas condiciones el instrumento proporciona una estimación de las potencias de ruido en el plano de referencia del dispositivo, en la que se asume implícitamente que las pérdidas entre las puertas 1 y 2 mostradas en la figura 4.1 son despreciables. La segunda opción consiste en calibrar sustituyendo la fuente por una carga adaptada en la puerta 1, y conectando la fuente en la puerta 2. De esta manera se obtiene el valor real de la potencia de ruido a la salida del dispositivo. Ambos procedimientos fueron probados sin obtener diferencias apreciables en la medición de la temperatura de ruido. La calibración y captura de datos se ha realizado mediante un programa desarrollado en Visual Basic, que se describe en el apéndice A-II.

IV.3 Caracterización de los componentes

La influencia de las pérdidas en el sistema de medida se ha evaluado caracterizando cada componente por separado. Para ello se ha utilizado el programa de captura de datos, que también permite realizar las medidas de ruido convencionales en dispositivos de dos puertas. La calibración se ha efectuado en todos los casos a la

entrada del medidor. Posteriormente se han conectado y medido, sucesivamente, en primer lugar el amplificador, después el amplificador con el circulador y finalmente el sistema completo de la figura 4.1, con un cortocircuito en la puerta 2 en lugar de la muestra. Las medidas se han realizado entre 1 GHz, que es el límite inferior de operación del circulador, y 1.6 GHz, que es la frecuencia máxima a la que puede trabajar el medidor de ruido utilizado sin necesidad de mezcladores externos.

Los resultados de la medida se muestran en la figura 4.2, en la que se observa que a las frecuencias comprendidas entre 1.4 y 1.6 GHz el sistema presenta las condiciones óptimas para la medida: su temperatura de ruido es inferior a la temperatura mínima del dispositivo que se va a caracterizar, que es la temperatura ambiente.

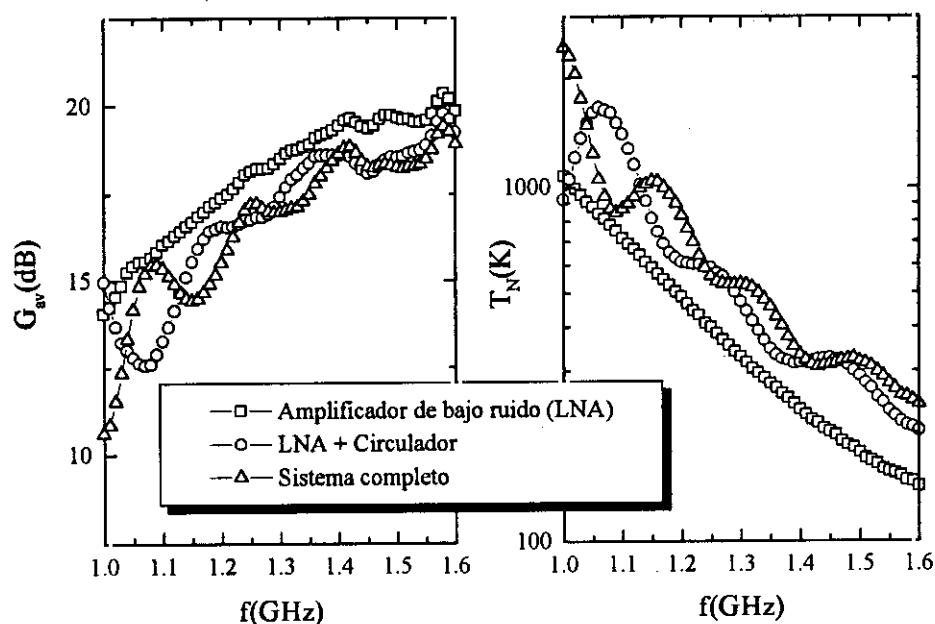


Figura 4.2. Influencia del circulador y la red de polarización en la temperatura de ruido y ganancia global del sistema de medida.

La pendiente de la temperatura de ruido en la banda de operación revela que la frecuencia mínima a la que se pueden hacer las medidas con precisión está limitada por el propio amplificador. La frecuencia central de diseño del mismo es de 2 GHz,

según datos facilitados por el fabricante. Aunque esta frecuencia se encuentra fuera de la banda de operación del circulador y del medidor de ruido, se ha considerado que este hecho no afecta de forma apreciable a la precisión final de las medidas; por los motivos que se exponen a continuación.

La potencia de ruido suministrada por el dispositivo a caracterizar no sufre alteraciones por las reflexiones del amplificador debido al aislamiento del propio circulador. Las señales reflejadas por el amplificador sólo pueden incidir en la carga a través de la fuente de ruido, pero esta vía está cortada por el atenuador existente en la propia fuente, que absorbe la señal que incide en él. La existencia de reflexiones en el amplificador afectaría, en principio, a la potencia de ruido suministrada por la fuente: los datos de calibración aportados por el fabricante son válidos cuando no existen reflexiones a la entrada de la fuente. No obstante, el atenuador interno de la fuente también resuelve este problema. Toda la reflexión generada por el amplificador se transmite íntegramente a la entrada de la fuente, pero se atenúa considerablemente antes de llegar al diodo de avalancha, que es el dispositivo generador de ruido.

La fuente utilizada dispone de un atenuador de 10 dB. Si se asocia una razón de onda estacionaria VSWR al coeficiente de reflexión visto por el diodo, la reducción de VSWR al insertar este atenuador se puede apreciar en la figura 4.3. Un

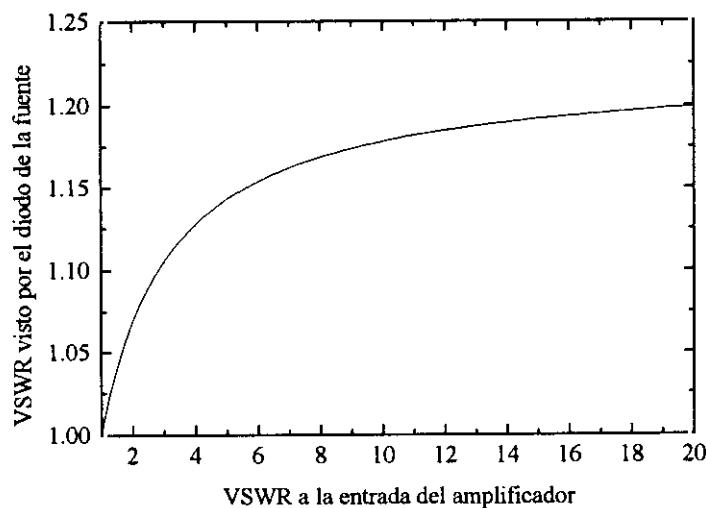


Figura 4.3. Influencia del atenuador interno de la fuente de ruido en la razón de onda estacionaria equivalente vista por el diodo de avalancha.

atenuador de 10 dB reduce el coeficiente de reflexión en un orden de magnitud, consiguiendo que el diodo de avalancha vea una carga prácticamente acoplada aún en el caso de que se cortocircuitara la fuente.

Así pues, la escasa incidencia de las reflexiones a la entrada del amplificador es el resultado directo de la utilización de una fuente de ruido con un atenuador interno. No obstante, existen fuentes de ruido comerciales que no disponen de atenuadores, y que presentan un cambio de impedancia importante entre sus dos estados. En estas condiciones el desacoplo a la entrada del amplificador puede influir de forma decisiva en la precisión de las medidas; ya que la señal reflejada incidiría directamente en el dispositivo generador de ruido, modificando la potencia suministrada por el mismo y falseando la calibración. Debido a ello, la estrategia de diseño en un amplificador de bajo ruido pensado para este tipo de medidas debe buscar fundamentalmente una optimización de la carga a la entrada del dispositivo activo, que simultáneamente permita minimizar la figura de ruido global y las pérdidas por reflexiones a la entrada del amplificador [143], [144].

Las fuentes de ruido sin atenuadores internos presentan la gran ventaja de que su factor ENR es mayor, lo que resulta conveniente para caracterizar dispositivos que alcancen temperaturas de ruido elevadas. En el caso de la fuente utilizada en las medidas que se presentan en esta tesis, el estado caliente se encuentra en torno a 1200 K, un valor suficientemente elevado para poder caracterizar con precisión las muestras en las corrientes más altas utilizadas, en donde no se han excedido los 1000 K de temperatura de ruido.

El factor A_{12B} puede ser medido con un analizador de redes vectorial, y también se puede estimar mediante medidas de ruido. Basta con conectar una carga en equilibrio y hacer uso de la ecuación 4.10 para determinar el coeficiente de reflexión a partir de la temperatura de ruido, que en este caso es igual a la temperatura física de la carga. Después se aplicaría la ecuación 4.11 para calcular A_{12B} . La tabla 4.I muestra

<i>Con analizador de redes</i>	<i>Con medidor de ruido</i>
0.976	0.991

Tabla 4.I. Factor de pérdidas entre las puertas 1 y 2 del montaje mostrado en la figura 4.1 a 1.5 GHz.

los valores de este parámetro obtenidos según ambos procedimientos a la temperatura de operación. La medida con el analizador de redes se realizó sustituyendo el medidor de ruido por una carga adaptada.

IV.4 Influencia del desacoplo del dispositivo

La temperatura de ruido del sistema tiene una influencia en la medida que varía muy considerablemente en función del coeficiente de reflexión que presente el dispositivo. La figura 4.4 ilustra este hecho, en donde se muestran las medidas de la temperatura de ruido de dos cargas en equilibrio a 300 K, con coeficientes de

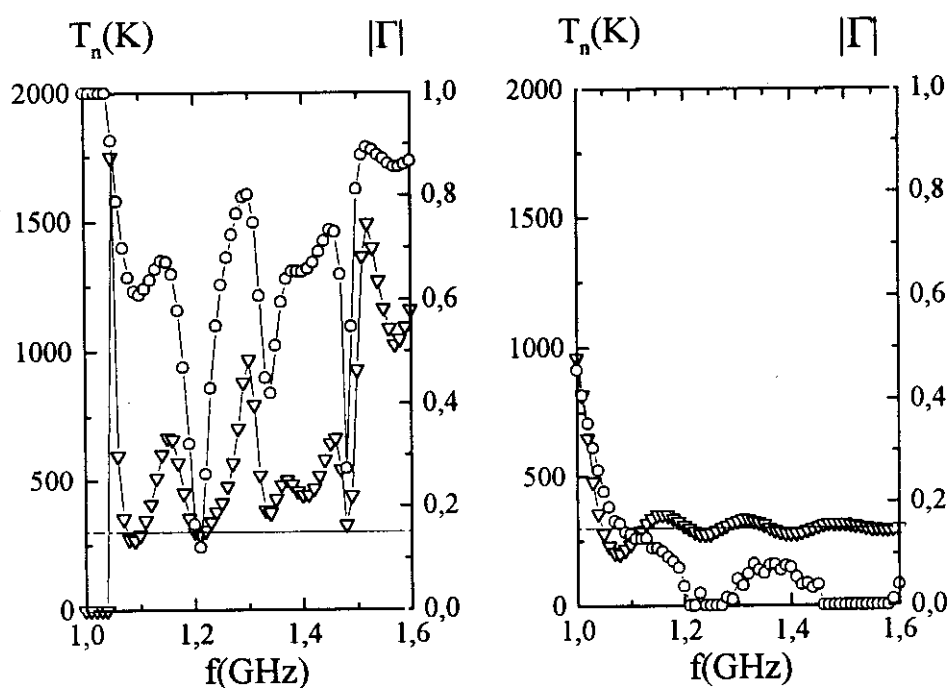


Figura 4.4. Influencia del sistema de medida en la estimación de la temperatura de ruido de dos cargas pasivas en equilibrio. Los círculos corresponden al coeficiente de reflexión, y los triángulos a la temperatura de ruido.

reflexión distintos. Una medida precisa de una carga altamente reflectiva es

considerablemente más difícil, y por tanto la utilización de muestras bien acopladas se considera crucial. Este hecho se puede comprender fácilmente revisando la ecuación 4.10, donde se mostró cómo obtener la temperatura de ruido a partir de las potencias medidas. Si el módulo del coeficiente de reflexión es muy próximo a la unidad, tanto el numerador como el denominador de esta ecuación tienden a anularse. La indeterminación resultante se refleja en las medidas de cargas altamente reflectivas mediante fuertes fluctuaciones de la temperatura de ruido. ¿Cómo puede resolverse este problema?

En electrónica de alta frecuencia la reducción de señales reflejadas puede realizarse, sin considerar aisladores, de dos formas diferentes: mediante un elemento disipativo (atenuador) o mediante un elemento reactivo (sintonizador). El primer procedimiento es el que se ha utilizado en el montaje que se muestra en la figura 4.5, con el que se han realizado medidas de ruido en dispositivos Schottky [129]. Esta forma de acoplo consiste en insertar un atenuador calibrado entre el dispositivo y el plano de referencia en el que se hace la medida.

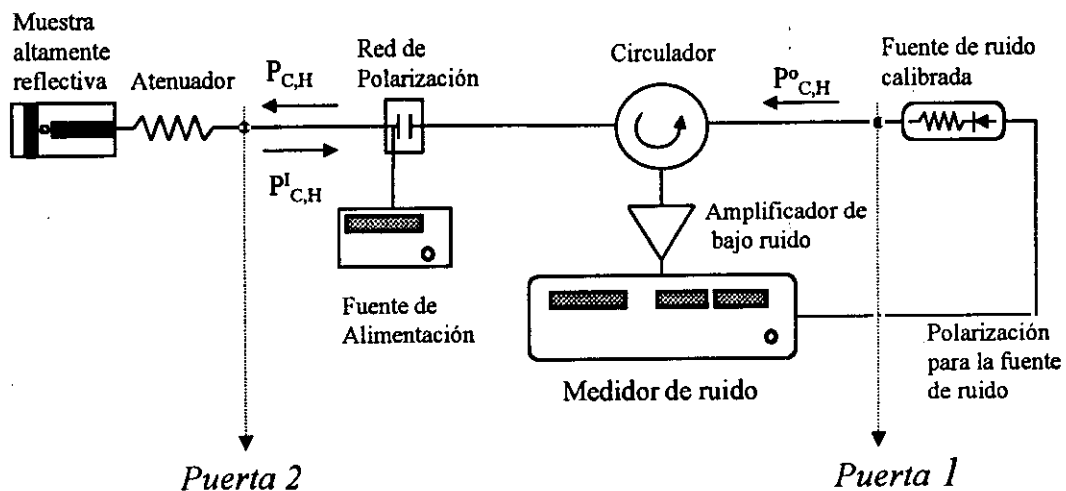


Figura 4.5. Medida de cargas altamente reflectivas con un atenuador.

En estas condiciones el coeficiente de reflexión medido experimenta una atenuación de

$$|\Gamma_{DUT}^I| = \frac{|\Gamma_{DUT}|}{A_{AT}^2}; \quad (4.13)$$

siendo A_{AT} el factor de atenuación. La temperatura de ruido del dispositivo se calcularía entonces a partir de la temperatura medida T_N mediante la expresión

$$T_{DUT} = \frac{T_N - T_R(1 - A_{AT})}{A_{AT}} \quad (4.14)$$

La reducción del coeficiente de reflexión permite obtener una mayor precisión y reproducibilidad en la medida, si bien sólo en el caso de cargas altamente reflectivas. Si la carga no presenta un coeficiente de reflexión elevado es preferible utilizar el procedimiento de acoplo alternativo, basado en un sintonizador, tal y como se mostró en la figura 4.1. En este procedimiento se puede insertar el elemento de acoplo entre la red de polarización y el circulator; puesto que al ser poco disipativo no contribuye de forma importante al aumento de la temperatura de ruido del sistema. La selección de este plano de referencia para hacer el acoplo presenta dos ventajas fundamentales: En primer lugar la corriente suministrada a través de la red de polarización llega directamente al dispositivo, y por tanto no es necesario considerar la caída de tensión de continua en el elemento de acoplo para determinar el campo en el interior de la muestra. En segundo lugar es posible incluir el sintonizador dentro de la calibración realizada por el medidor, de forma que no es necesario extraer la temperatura de ruido del dispositivo de la temperatura medida, tal y como debe hacerse con el atenuador.

El sintonizador utilizado consiste en una sección de guía coaxial con dos ramas ajustables mecánicamente. Para poder incluirlo en la calibración se utilizó el siguiente procedimiento. En primer lugar se realiza una calibración manteniendo las ramas del sintonizador en sus posiciones de origen, de modo que el elemento actúe

como una sección de línea de transmisión. Después de calibrar, se aplican 28 V a la fuente de ruido para activarla en su estado caliente y se visualiza en la pantalla del medidor la potencia suministrada a la salida del dispositivo, P_H^I . Si la carga estuviera perfectamente acoplada, toda la potencia de ruido suministrada por la fuente sería absorbida por la carga. En estas condiciones la única potencia de ruido que se mediría después de la calibración sería la generada por la propia carga, que al estar a la temperatura ambiente T_R es

$$P_H^I = \frac{T_R}{T_o} \quad (4.15)$$

así pues, toda la potencia de ruido que se mida por encima de este valor dará una indicación del desacoplo de la carga, pues tendrá su origen en el ruido que procede de la fuente y se refleja bien a la entrada del sintonizador o bien a la entrada de la muestra. En estas condiciones basta con ajustar las ramas del sintonizador hasta conseguir minimizar P_H^I . Una vez realizado el acoplo se repite la calibración para compensar completamente la contribución del sintonizador con las ramas en sus nuevas posiciones.

IV.5 Diseño y caracterización de las muestras

Las muestras utilizadas en las medidas de la temperatura de ruido se fabricaron con técnicas de epitaxia por haces moleculares, con metalización de AuGe y AuGeNi. La capa epitaxial fue crecida con orientación (100) sobre un sustrato de GaAs semiaislante, con dopante de Si. Las máscaras empleadas en la fabricación de los contactos se muestran en la figura 4.6, y las dimensiones correspondientes en la tabla 4.II.

Las estructuras #1 y #2 son de tipo TLM, ampliamente utilizadas debido a que permiten calcular la resistencia de los contactos mediante una simple representación gráfica de las resistencias totales medidas para cada uno de los canales en función de la longitud de los mismos. El ajuste de las gráficas a una recta proporciona el doble de

la resistencia del contacto a partir del valor de la ordenada en el origen de longitudes de canal. La estructura #3 es típica de medidas de efecto Hall. Para estimar la resistencia de los contactos en esta estructura se utilizó el valor de la movilidad Hall

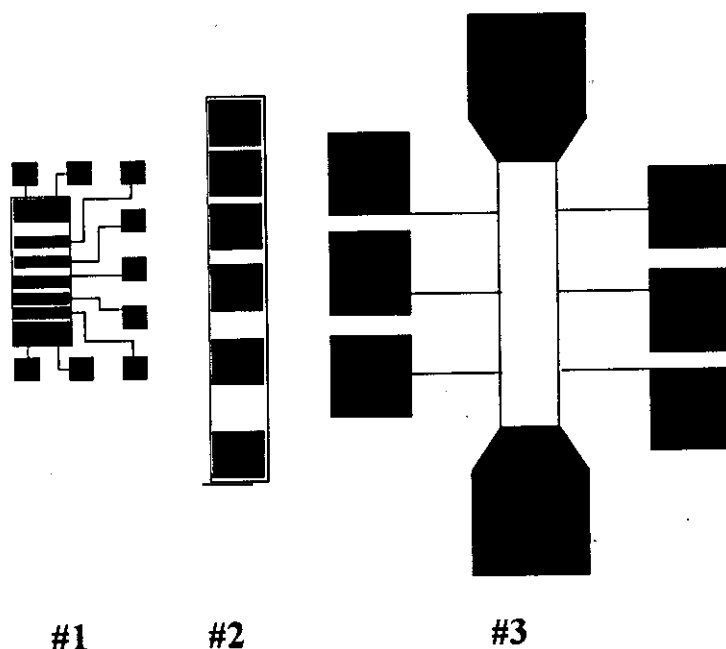


Figura 4.6. Estructura de las muestras empleadas en las medidas. En las dos primeras estructuras la anchura de la capa epitaxial es 10 micras superior a la anchura de los contactos.

Mascara	Longitud de los canales (micras)	Anchura de capa epitaxial (micras)	Anchura de contactos (micras)
#1	17.2, 9.3, 5.5, 3.2, 1.5, 2	100	90
#2	100, 50, 30, 20, 10	110	100
#3	700	100	100

Tabla 4.II. Dimensiones de las muestras empleadas en la medidas

suministrada por los fabricantes de la muestra.

La conexión de las muestras al sistema de medida puede realizarse mediante dos procedimientos distintos: la sonda de alta frecuencia y la microsoldadura a una línea de transmisión. La primera opción ofrece la importante ventaja de que resulta más fácil conectar y desconectar los dispositivos que vayan a caracterizarse. Sin

embargo, las sondas presentan generalmente resistencias de varios Ohm; y por tanto obligan a utilizar patrones de calibración en chip [145]. Por este motivo, todas las muestras utilizadas en las medidas fueron montadas en línea microstrip mediante microsoldaduras.

Las líneas se construyeron con un sustrato cuyas propiedades se presentan en la tabla 4.III. El diseño se realizó para tener una impedancia característica de 50 Ohm,

Material	Permitividad	Metalización	Espesor del sustrato (mm)
Duroide	2.23	Cobre	0.787

Tabla 4.III. Características del sustrato utilizado para la construcción de las monturas que conectan las muestras con el sistema de medida.

utilizando una herramienta de simulación de circuitos de alta frecuencia [146]. La estructura de la montura diseñada para las muestras se puede observar en la figura 4.7. La anchura de las líneas de 50 Ohm es de 2.32 mm. La longitud, de 15 mm, fue seleccionada arbitrariamente. Estas líneas presentan la ventaja de tener a 1.5 GHz

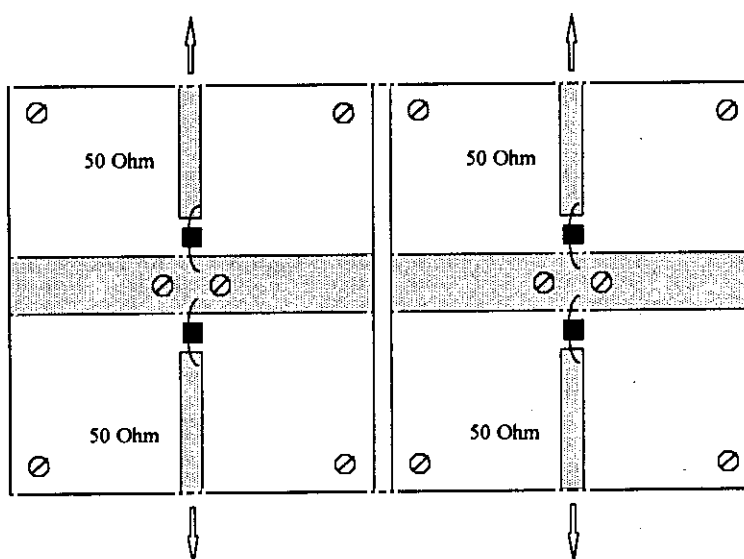


Figura 4.7. Montura para la conexión de las muestras al sistema de medida. La montura fue diseñada para 4 muestras, cada una de ellas con salida coaxial tipo SMA.

unas pérdidas suficientemente bajas como para poder despreciar su contribución a la potencia de ruido suministrada a la entrada del sistema de medida.

La máscara se fabricó en mylar con el programa MWAVE2, el cual permite controlar un plotter con una plumilla de aluminio y una punta de acero para la definición y recorte de las líneas [147].

Las características de las muestras utilizadas se presentan en la tabla 4.IV. En todos los casos el espesor de la capa epitaxial es muy inferior a la longitud y anchura de los canales, y por tanto el campo en el interior del canal se ha considerado

Muestra	Máscara	Dopado (cm ⁻³)	Anchura (μm)	Longitud (μm)	Espesor (μm)	R _m (Ohm)	R _c (Ohm)
#A	#3	1.3·10 ¹⁸	100	700	1.3	180.0	34
#B	#2	5.0·10 ¹⁸	100	100	2.5	5.5	<1
#C	#1	4.0·10 ¹⁷	90	17.2	0.2	48.3	7
#D	#2	4.0·10 ¹⁸	100	100	0.35	34.5	<1

Tabla 4.IV. Dimensiones de los canales montados sobre las líneas microstrip. R_m es la resistencia total de la muestra medida con sondas calibradas conectadas a las líneas, una vez realizadas las microsoldaduras. R_c es la resistencia de los contactos.

uniforme. Las muestras #A, #B y #C fueron suministradas por gentileza de distintos laboratorios; mientras que la muestra #D fue diseñada específicamente para tener una resistencia de 50 Ohm, con objeto de facilitar el acoplo con el sintonizador. Utilizando el canal más largo de la máscara #2 y suponiendo una contribución despreciable de los contactos, el simulador proporcionó para un dopado de 4·10¹⁸ cm⁻³ un espesor de 0.26 micras. La capa epitaxial fabricada finalmente presentó un espesor ligeramente superior, lo que justifica que la resistencia final de esta muestra (34.5 Ohm) sea más baja de la esperada (50 Ohm).

La importancia de la tecnología de la metalización se refleja claramente con una comparación directa de las resistencias de los contactos obtenidas en las muestras #A y #C. A pesar de que la primera tiene un dopado superior al doble del dopado de la segunda, la resistencia de sus contactos es considerablemente mayor. No obstante, la movilidad Hall medida en la muestra #A, 2280 cm²/Vs, concuerda bien con la movilidad de arrastre simulada por el método de Monte Carlo; que predice un valor de 2350 cm²/Vs utilizando el modelo con todos los efectos de degeneración incluidos.

Esta comparación avala la calidad de la capa epitaxial de esta muestra a pesar de la tecnología de la metalización.

Asimismo, la obtención de la resistencia de los contactos en las estructuras TLM permite estimar la resistencia del canal y por tanto realizar una comparación directa con los resultados de la simulación. La tabla 4.V muestra las resistencias de los canales medidas, junto con las simuladas bajo la suposición de un campo uniforme. En todos los casos se obtuvo una excelente precisión en la estimación de las resistencias.

Muestra	μ_{sim} (cm ² /Vs)	R_{sim} (Ohm)	$R_{int\ meas}$ (Ohm)
#A	2350	110	112
#B	1103	4.5	5.5
#C	3710	40	34.3
#D	1208	37	34.5

Tabla 4.V. Simulación y medida de la resistencia de los canales.

IV.6 Estimación de la temperatura física de las muestras

La utilización de polarizaciones continuas en las medidas de ruido presenta distintas ventajas frente a las medidas con polarizaciones pulsadas. El proceso de calibración es más sencillo y por tanto permite realizar medidas con un grado de precisión que no se puede conseguir utilizando pulsos. Asimismo, la utilización de pulsos puede originar daños irreversibles en las muestras incluso con polarizaciones moderadas, que no son detectables con medidas de continua [148]. Otra importante desventaja de las medidas pulsadas es que los armónicos de alta frecuencia que se generan con el pulso no pueden separarse de la potencia de ruido que se desea medir. Consecuentemente, las medidas pulsadas deben realizarse a frecuencias lo más altas posibles, con las dificultades añadidas que ello implica en términos de calibración.

Las medidas en continua permiten hacer una caracterización más realista del ruido generado por la muestra en condiciones normales de operación, pero presentan el inevitable inconveniente de que la muestra se calienta por efecto Joule. Este calentamiento fuerza la necesidad de estimar la temperatura física en el material con la

mayor precisión posible, dificulta la simulación y limita el campo máximo que puede alcanzarse antes de dañar la muestra. En la bibliografía consultada se han encontrado distintos procedimientos para calcular la temperatura física en estructuras similares a las utilizadas en esta tesis [149]-[152]. Los distintos modelos encontrados proponen que el calor en las estructuras tipo mesa se disipa fundamentalmente por el sustrato, para el cual existen distintas expresiones analíticas o tablas obtenidas por resolución numérica de la ecuación del calor; que permiten determinar la resistencia térmica equivalente. La resistencia térmica relaciona la diferencia de temperaturas entre las dos caras opuestas del sustrato. Si la base se encuentra a la temperatura ambiente T_0 , es posible estimar la temperatura en la muestra T a partir de la potencia P disipada en la misma, como

$$T = T_0 + PR_{th} \quad (4.16)$$

siendo R_{th} la resistencia térmica.

No obstante, es posible obtener con mayor precisión la temperatura física mediante una comparación directa de los resultados de la simulación de Monte Carlo a distintas temperaturas con la característica I-V experimental. Este método presenta importantes ventajas frente a las estimaciones basadas en los procedimientos anteriormente mencionados. En primer lugar, no es necesario imponer la hipótesis de que la base del sustrato se encuentra a temperatura ambiente, o a una temperatura conocida. Esta hipótesis debe hacerse en las simulaciones térmicas convencionales, puesto que en la práctica no es posible realizar una medida precisa de la temperatura en la base del sustrato. Por otra parte, la suposición de que esta temperatura coincide con la ambiente puede ser inadecuada si la base no está en contacto directo con un material que sea un buen disipador del calor. Tampoco es posible estimar con precisión los gradientes térmicos existentes en los contactos, que son decisivos para determinar cuál es la resistencia térmica equivalente que presentan.

La simulación por Monte Carlo de las movilidades a distintas temperaturas permite asociar cada punto de la característica I-V con su temperatura física

correspondiente, y obtener de forma semiempírica la dependencia de la temperatura con la polarización.

Se realizaron simulaciones a 4 temperaturas distintas comprendidas entre 300 y 450 K, a un campo eléctrico de 0.5 KV/cm. Posteriormente se aplicó un filtro FFT de 5° orden para suavizar la curva $\mu(T)$ resultante con ayuda de un programa comercial de visualización gráfica. Para evitar que las imprecisiones en la simulación de las movilidades se propaguen a la estimación de la temperatura, se ha realizado la comparación mediante valores normalizados a los obtenidos a 300 K. La figura 4.8 muestra los resultados de la degradación de las movilidades con la temperatura.

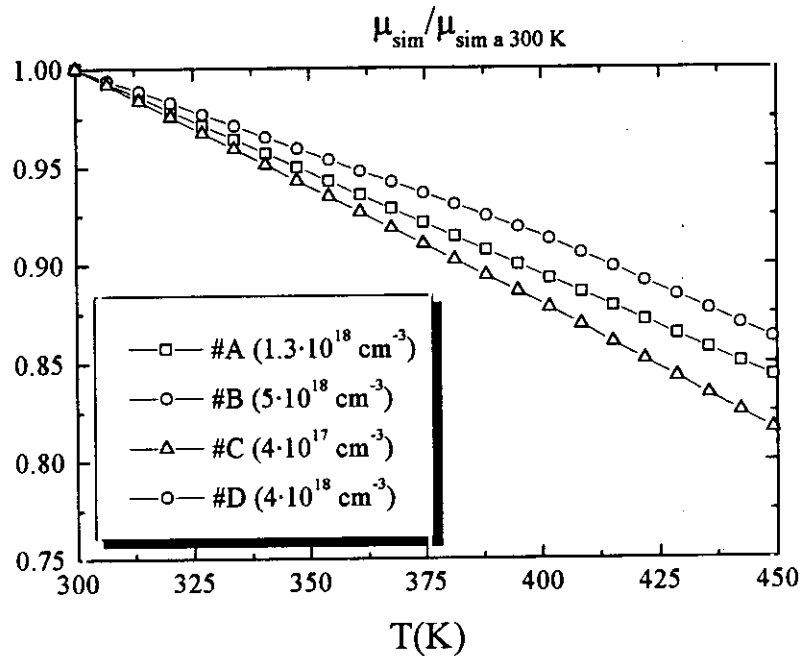


Figura 4.8. Degradación de las movilidades de arrastre con la temperatura.

Por otra parte, la curva experimental I-V permite asociar una movilidad equivalente para cada punto de polarización, según la expresión

$$\mu_{\text{exp}}(T(I)) = G(T(I)) \frac{1}{qN_d W} \quad (4.17)$$

siendo W el área transversal del canal, l la longitud y G la conductancia experimental intrínseca, que debe obtenerse eliminando la contribución de la resistencia de los contactos, ya calculada en el apartado anterior.

Así pues, la normalización a la temperatura de 300 K, que se asocia a la corriente más débil utilizada, da lugar a

$$\frac{\mu_{\text{exp}}(T(I))}{\mu_{\text{exp}, 300 \text{ K}}} = \frac{G_{\text{exp}}(T(I))}{G_{\text{exp}, 300 \text{ K}}} \quad (4.18)$$

La figura 4.9 muestra las conductancias experimentales medidas para cada muestra, junto con las temperaturas obtenidas a partir de la ecuación 4.18. La muestra

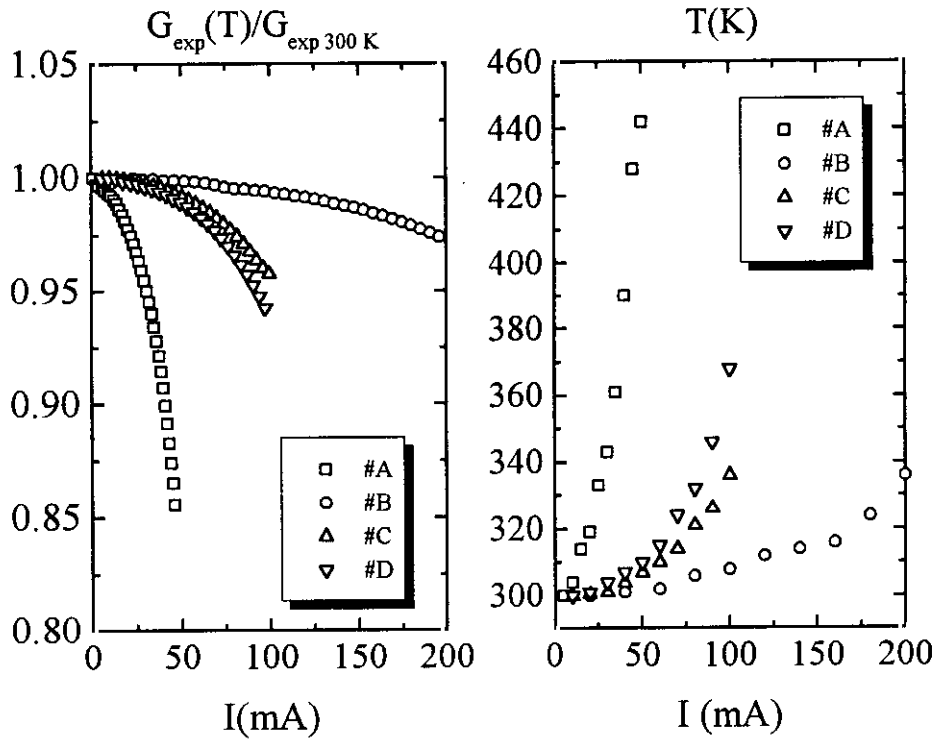


Figura 4.9. Conductancias experimentales normalizadas de las muestras, junto con las temperaturas físicas estimadas.

#A es la que alcanzó una mayor temperatura, debido a que el espesor de su sustrato (500 μm) es considerablemente mayor que los sustratos de las muestras #B y #C (250 μm) y #D (350 μm), lo que impide una disipación eficiente del calor en dicha muestra.

IV.7 Resultados de las medidas y comparación con las simulaciones

La caracterización de cada una de las muestras se efectuó según el procedimiento descrito en el apartado IV.4, realizando un acoplo reactivo al principio de cada medida. Siguiendo los resultados obtenidos en la caracterización del sistema experimental (apartado IV.3), se seleccionó una frecuencia de operación de 1.5 GHz. La tabla 4.VI muestra la potencia de ruido disponible a la salida de la muestra antes y después de realizar el acoplo.

Muestra	Antes de acoplar	Después de acoplar
#A	72%	94%
#B	62%	94%
#C	85%	97%
#D	81%	97%

Tabla 4.VI. Potencia de ruido transmitida al sistema de medida como porcentaje de la potencia total generada por la muestra.

La variación del coeficiente de reflexión con la polarización fue prácticamente nula, tal y como se muestra en la figura 4.10, lo que permite garantizar que el acoplo realizado en condiciones de equilibrio es válido para todas las corrientes de polarización empleadas.

Las corrientes máximas que se han podido aplicar sin correr el riesgo de dañar la muestra están limitadas fundamentalmente por el calentamiento por efecto Joule, lo que presenta una restricción importante a los campos máximos obtenidos, que se muestran en la tabla 4.VII.

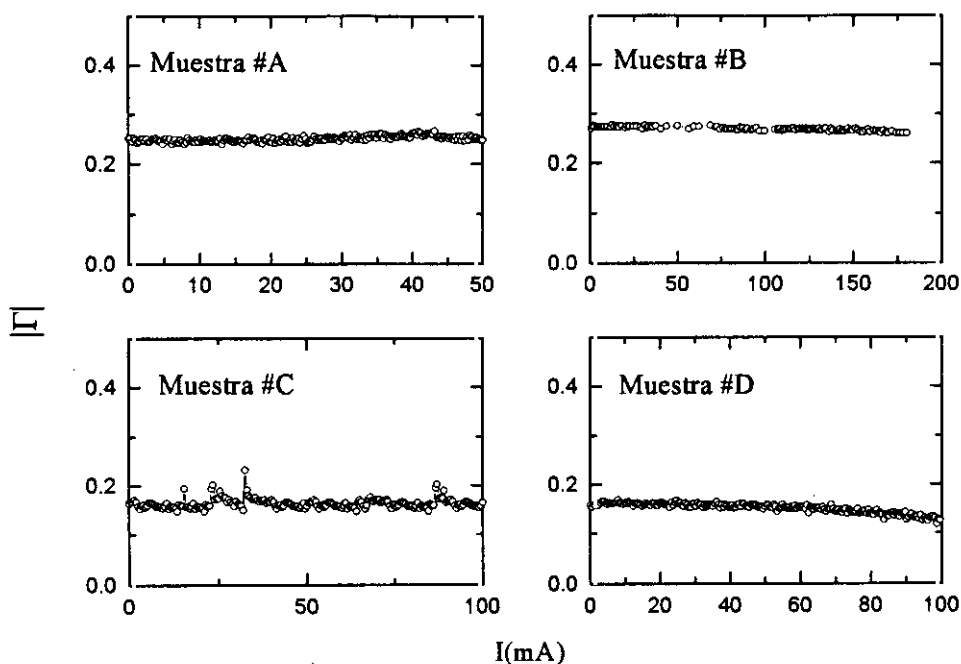


Figura 4.10. Módulo del coeficiente de reflexión obtenido a partir de las potencias de ruido medidas.

La figura 4.11 muestra las temperaturas de ruido simuladas y medidas. La

Muestra	F(KV/cm)
#A	0.08
#B	0.11
#C	1.0
#D	0.35

Tabla VII. Campo eléctrico máximo aplicado a las muestras durante las medidas de ruido.

caracterización experimental de todas las muestras se efectuó a temperaturas ambientes muy similares (301 K en el caso de las muestras #A, #B y #C; y 303 K en la muestra #D). Estas temperaturas fueron reproducidas con excelente precisión mediante las medidas de ruido en condiciones de equilibrio, hecho que avala la sensibilidad del sistema empleado así como la precisión de la técnica de calibración descrita en el apartado IV.4.

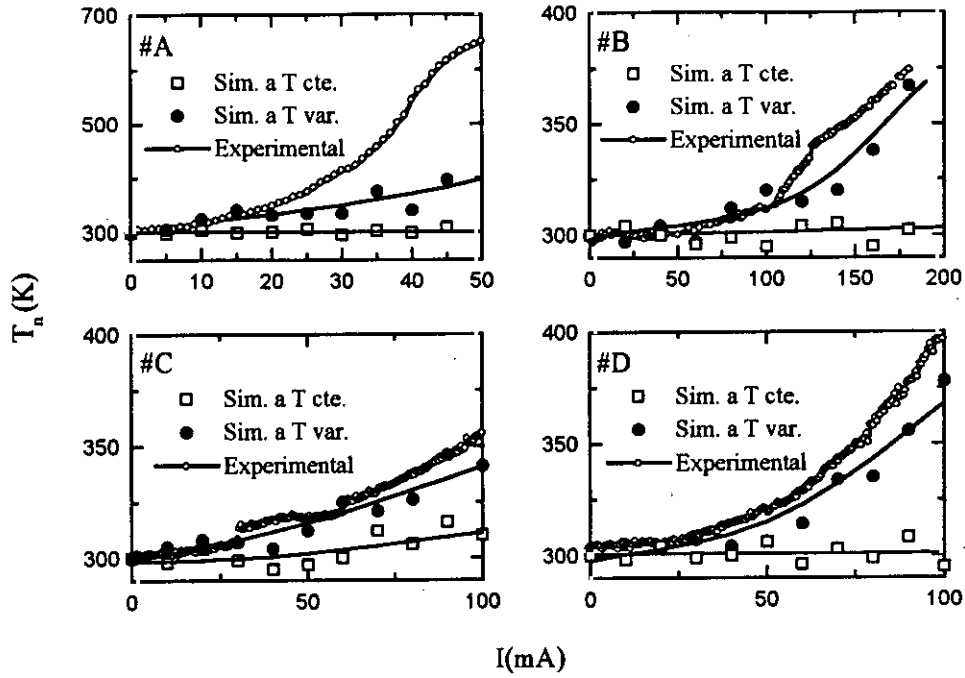


Figura 4.11. Temperaturas de ruido medidas (círculos blancos pequeños) en comparación con las simuladas a temperatura constante (rectángulos blancos) y variable (círculos negros). Las líneas continuas se obtuvieron aplicando un filtro FFT de quinto orden a las simulaciones.

Para poder aplicar la ecuación 2.1 en el cálculo de la temperatura de ruido fue necesario añadir a la densidad espectral de fluctuaciones de velocidad un factor de corrección dado por las integrales de Fermi de orden $1/2$ y $-1/2$, de forma análoga a como se corrige la relación de Einstein para determinar el coeficiente de difusión D en gases de electrones degenerados [153], dado por

$$D = 2 \frac{kT\mu}{q} \frac{F_{1/2}(\eta)}{F_{-1/2}(\eta)} \quad (4.19)$$

Así pues, la temperatura de ruido se calculó según la ecuación

$$T_N(f) = \frac{qS_v(f)}{8k\mu_d(f)} \frac{F_{-1/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)} \quad (4.20)$$

En condiciones de no degeneración, el cociente de las integrales de Fermi tiende a 2, obteniéndose la ecuación 2.5, es decir

$$T_N(f) = \frac{qS_v(f)}{4k\mu_d(f)} \quad (4.21)$$

Tal y como se observa experimentalmente, la temperatura de ruido es igual a la temperatura física del material para todos los dopados y en ausencia de polarización. Este resultado sólo pudo conseguirse aplicando el factor de corrección propuesto. La necesidad de realizar esta corrección se atribuye a que la definición de temperatura de ruido utilizada en la ecuación 4.21 se basa en el teorema de Nyquist, el cual es rigurosamente válido sólo cuando puede aplicarse el principio de equipartición maxwelliano. Así se especifica claramente en el trabajo original de Nyquist, publicado en 1928 [154], al igual que en referencias posteriores [33]. La corrección al teorema de Nyquist adquiere importancia a partir de dopados de $4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (muestra #B). A este dopado la temperatura de ruido en equilibrio que se ha obtenido utilizando directamente la ecuación 4.21 fue de 510 K para una temperatura de la muestra de 300 K. Sin embargo, con la ecuación 4.21 se obtuvieron temperaturas de 321 y 307 K para los dopados 10^{18} cm^{-3} (muestra #A) y $4 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (muestra #C), respectivamente. Recientemente se ha publicado un trabajo en el que se utiliza la ecuación 4.21 sobre simulación y medida de ruido en GaAs degenerado [155], para un dopado de $7.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Sin embargo las medidas se realizaron a 80 K y el autor encontró en sus muestras un grado de compensación que redujo la concentración de electrones a $3 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Por tanto, las correcciones al teorema de Nyquist para calcular la temperatura de ruido no son importantes en este caso.

La muestra #A es la que presenta mayores discrepancias entre las medidas y la simulación. La elevada resistencia de sus contactos hace suponer que ésta puede variar apreciablemente con la temperatura, hecho que no ha sido considerado en la simulación. No obstante las discrepancias son suficientemente importantes como para pueda aceptarse la hipótesis de una contribución adicional al ruido generado, que necesariamente debe proceder del contacto. Esta hipótesis es consistente con el hecho

de que la movilidad Hall medida en esta muestra se ajuste con gran precisión al valor simulado, y que además los resultados de la simulación de la temperatura de ruido con las otras muestras no presenten discrepancias tan importantes.

La comparación de las simulaciones a temperatura constante con las realizadas a temperatura variable pone de manifiesto la importancia que puede llegar a alcanzar el calentamiento por efecto Joule en cálculos de ruido. No obstante, la temperatura de ruido medida en la muestra #C exhibe una contribución apreciable por parte del calentamiento de los electrones. Este hecho es consistente con el menor dopado y el campo máximo alcanzado en esta muestra.

Las muestras #B y #C presentan un comportamiento escalonado, que no se manifiesta en las otras dos. Así pues, este comportamiento es atribuible a la tecnología de fabricación, y no a las propiedades intrínsecas del material. Dado que en la muestra #D se utilizó la misma tecnología de metalización que en #B y #C, el origen de los escalones debe buscarse en el proceso de crecimiento epitaxial. Las muestras #B y #C fueron crecidas utilizando As_2 , mientras que en las otras dos se empleó As_4 . Los escalones son cuantitativamente muy poco pronunciados y por tanto difíciles de detectar. No obstante, el uso de As_2 o As_4 en el crecimiento epitaxial ha demostrado marcar diferencias muy considerables en el ruido a frecuencias de microondas en gases de electrones 2D creados en estructuras AlGaAs/GaAs [131].

IV.8 Conclusiones

En este capítulo se ha descrito un método para realizar medidas de ruido en dispositivos de una puerta, que permite obtener simultáneamente la temperatura de ruido y el módulo del coeficiente de reflexión. El sistema experimental utilizado emplea un sintonizador reactivo, con objeto de maximizar la potencia de ruido que la muestra suministra al medidor.

La caracterización de dos cargas de distinto coeficiente de reflexión a distintas frecuencias ha permitido ilustrar cómo se degrada la precisión de las medidas cuando las muestras son altamente reflectivas; justificándose así la utilización del elemento de acoplo en el sistema experimental. Haciendo uso de esta misma caracterización, se ha

delimitado el margen de frecuencias en las que el sistema permite realizar las medidas con mayor precisión.

La libertad de elección en la frecuencia de trabajo ha sido posible gracias al hecho de que los mecanismos de dispersión que operan en el material tienen constantes de tiempo del orden del picosegundo; tal y como se pudo observar en las simulaciones de Monte Carlo presentadas en capítulos anteriores. Gracias a ello, no se pueden esperar variaciones significativas en la temperatura de ruido intrínseca a la muestra en frecuencias inferiores a varios centenares de GHz. Asimismo, la utilización de frecuencias suficientemente bajas permite minimizar las contribuciones al ruido que presentan los elementos parásitos en la montura. De este modo el procedimiento de calibración se simplifica y resulta más sencillo realizar medidas precisas y repetibles.

La utilización de polarizaciones no pulsadas ha forzado la necesidad de estimar la temperatura física de la muestra. Las técnicas de simulación de Monte Carlo han hecho posible que se pueda realizar esta estimación con un grado de precisión razonable, utilizando la característica I-V experimental de la muestra y el valor de la resistencia de los contactos. Esta estimación ha demostrado ser capaz de mejorar apreciablemente la precisión de las simulaciones de ruido. No obstante, las medidas con muestras fabricadas con tecnologías diferentes ha revelado la influencia del proceso de fabricación en la temperatura de ruido; el cual puede llegar a marcar diferencias cualitativas en las características T_n -I.

CAPÍTULO V

CONCLUSIONES FINALES

V.1 Aportaciones más destacadas

Se considera que las aportaciones más importantes que se ofrecen en esta tesis doctoral son las siguientes:

- a) Se ha propuesto un procedimiento para reducir el número de veces que se invoca la rutina de generación de números aleatorios en una simulación de Monte Carlo, y se ha comprobado con distintos ejemplos que este procedimiento puede reducir la llamada a dicha rutina en más de un 40% con respecto al algoritmo propuesto por Sangiorgi, Riccò, y Venturi.
- b) Se ha propuesto una técnica de estimación espectral basada en el principio de Máxima Entropía para el cálculo de ruido en materiales semiconductores, y se ha comprobado con ejemplos que en numerosos casos de interés práctico puede ser más eficiente que las técnicas de estimación basadas en el teorema de Wiener-Khintchine.
- c) Se ha ilustrado con distintas simulaciones la utilidad de la función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad para delimitar el régimen balístico en un semiconductor. Los ejemplos presentados han mostrado que la distancia necesaria para obtener la termalización de los portadores a 77 K puede ser superior a 2 μm en campos elevados, y para concentraciones de impurezas moderadas. Esta falta de termalización puede ser una de las causas de las discrepancias entre las simulaciones clásicas por Monte Carlo de coeficientes de difusión con distintos trabajos experimentales que se han encontrado en la bibliografía.
- d) Se han realizado refinamientos a los modelos físicos clásicos empleados en las simulaciones de Monte Carlo para mejorar la precisión en la caracterización de materiales degenerados. En concreto, se ha propuesto un método para considerar los efectos de acoplo entre fonones y plasmones.

- e) Se ha verificado la validez de los modelos físicos utilizados en las simulaciones que se presentan en esta tesis mediante distintas comparaciones con resultados experimentales. Se ha comprobado que el simulador desarrollado es capaz de calcular con precisión las velocidades de los portadores en materiales dopados hasta niveles habituales en contactos óhmicos ($10^{18} - 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$).
- f) Se ha montado un sistema de medida de ruido a frecuencia de microondas en dispositivos de una puerta. En este sistema se puede obtener simultáneamente y sin medidas adicionales la temperatura de ruido y el módulo del coeficiente de reflexión. Asimismo, el acoplo de las muestras mediante un elemento reactivo ha permitido que la potencia de ruido suministrada al radiómetro exceda, en todos los casos estudiados, el 90% de la potencia total generada por las muestras; consiguiéndose así una excelente precisión en las medidas.
- g) Se han presentado medidas de distintas muestras de GaAs degenerado. El dopado máximo utilizado ($5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) excede en más de un orden de magnitud el dopado máximo empleado en referencias previas que ofrecen medidas de ruido de GaAs homogéneo a frecuencia de microondas.
- h) Se ha propuesto un procedimiento semiempírico que combina la simulación de Monte Carlo a distintas temperaturas con la medición de la característica I-V de la muestra, gracias al cual se ha podido estimar la temperatura física alcanzada en cada punto de polarización. Este método ofrece dos ventajas clave frente a los modelos de simulación térmica habitualmente utilizados: no es necesario conocer la temperatura en la base del sustrato, ni tampoco hacer hipótesis sobre las resistencias térmicas que presentan los contactos.
- i) Por último, se ha desarrollado un programa para el control de un medidor de ruido con el que se pueden realizar medidas de dispositivos de una y dos puertas, siendo sus principales características su facilidad de uso para otros investigadores (ha sido utilizado con éxito por investigadores del

Institut für Hochfrequenztechnik de Darmstadt, en Alemania) y su versatilidad en el tratamiento de datos.

Se considera que estas aportaciones son, en distinta medida, aplicables a ámbitos más generales que los que se han tratado en esta tesis. De hecho, algunos de los resultados obtenidos se han aplicado ya a otras líneas de investigación.

Así, el sistema de medida ya ha demostrado su potencial en la caracterización de distintos dispositivos. Distintos investigadores del Institut für Hochfrequenztechnik de Darmstadt han utilizado este sistema para realizar medidas de la temperatura de ruido en diodos Schottky submicrométricos de GaAs, fabricados por dicha institución para la Agencia Espacial Europea. La frecuencia de operación óptima para el sistema, 1.5 GHz, es ampliamente utilizada como frecuencia intermedia en aplicaciones de detección y mezclado a bandas localizadas en el rango de THz. Asimismo, las medidas de ruido a frecuencias de microondas han permitido realizar una evaluación del daño producido por estrés térmico en dispositivos que fueron producidos con distintas tecnologías. La información obtenida ha sido de utilidad para refinar las tecnologías de fabricación de diodos Schottky.

Asimismo, las técnicas experimentales desarrolladas en esta tesis también se han aplicado a la cualificación de tecnologías de fabricación de gases bidimensionales en heteroestructuras AlGaAs/GaAs. Además de la importancia bien conocida de los gases bidimensionales en la fabricación de transistores de bajo ruido (HEMT), se ha demostrado recientemente el interés de estos sistemas en la fabricación de detectores de campos magnéticos altamente sensibles. En las medidas realizadas en GaAs degenerado que se han presentado en esta tesis se apreciaron diferencias cualitativas entre distintas muestras, que se atribuyen a la tecnología de crecimiento epitaxial. Si bien en este caso se obtuvieron diferencias en la temperatura de ruido muy pequeñas, en el caso del gas de electrones bidimensional la temperatura de ruido es considerablemente más sensible a las tecnologías de fabricación. Se han realizado medidas de ruido en dos estructuras idénticas de AlGaAs/GaAs, en las que la única diferencia ha sido la utilización de As₂ en un caso y As₄ en el otro para el crecimiento

las capas epitaxiales. Las movilidades medidas en ambas muestras fueron excelentes, pero las medidas a 1.5 GHz que se hicieron con el sistema experimental desarrollado revelaron que la temperatura de ruido alcanzada en la muestra crecida con As₂ es considerablemente más elevada; y además presenta una dependencia con la corriente de polarización cualitativamente distinta a la dependencia obtenida en la muestra fabricada con As₄. Esta evidencia ilustra el relevante papel que puede desempeñar la medida del ruido en alta frecuencia para cualificar tecnologías de fabricación. De hecho, la propia diferenciación de estas medidas de ruido a 1.5 GHz revela que es posible encontrar mecanismos procedentes de defectos estructurales que son capaces de seguir y perturbar señales de alta frecuencia. Esta peculiaridad hace de estos mecanismos que sean difícilmente detectables mediante otros tipos de técnicas de caracterización, tales como las medidas de capacidades en transitorios (DLTS). Por otra parte, la dificultad de obtener capacidades elevadas en uniones metal-semiconductor degenerado complica la medición precisa de la capacidad. Asimismo, las medidas de ruido presentan el importante aliciente de que no es necesario refrigerar el material para su caracterización.

V.2 Futuros desarrollos

Uno de los futuros desarrollos que se consideran más importantes de esta tesis es la de investigar los efectos de la interacción electrón-electrón de corto alcance sobre los coeficientes de difusión en condiciones alejadas del equilibrio, y sobre la temperatura de ruido. En la bibliografía consultada no se ha encontrado ningún procedimiento para incluir este efecto que esté suficientemente avalado por resultados experimentales; y se considera que la interacción electrón-electrón de corto alcance debe ser investigada con mayor profundidad para conseguir un modelo que sea consistente con el principio de indistinguibilidad de la mecánica cuántica.

Por otra parte, el simulador desarrollado en esta tesis constituye un avanzado punto de partida para abordar la investigación de otros semiconductores III-V, como

el InP, InSb, GaP o GaN. Los modelos físicos utilizados en el simulador son aplicables con escasas modificaciones a estos materiales, y pueden permitir calcular las curvas v - F y los coeficientes de difusión en condiciones alejadas del equilibrio. Asimismo, se puede investigar el potencial de cada uno de estos semiconductores en aplicaciones de bajo ruido. El estudio de los compuestos ternarios es también viable con escasas modificaciones adicionales, si bien requiere añadir un mecanismo de dispersión más ("alloy scattering") a los ya incorporados en el simulador. La utilidad de la función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad para delimitar regímenes balísticos también puede ser explotada en la investigación de estos materiales.

Los resultados obtenidos en esta tesis también pueden ser de utilidad para la simulación de dispositivos completos. En este aspecto ya se ha desarrollado un simulador multipartícula para dispositivos Schottky de una dimensión, en el que aún no se han incluido los efectos de degeneración considerados en esta tesis. Con este simulador se ha podido reproducir tanto la característica I - V como las funciones de autocorrelación obtenidas en un trabajo reciente [73]. Se considera de gran interés el continuar el desarrollo de este simulador para investigar los efectos de la interacción electrón-electrón de corto y largo alcance sobre la distribución de campos en homouniones degeneradas, así como sobre la temperatura de ruido de un dispositivo real. Un simulador de estas características, extendido a dos dimensiones, permitiría obtener resultados directamente comparables con características experimentales I - V y T_n - I de dispositivos Schottky submicrométricos. El GaAs sigue siendo uno de los semiconductores más ampliamente utilizados para el desarrollo de estos dispositivos en aplicaciones espaciales, en particular para el diseño de mezcladores a frecuencias de THz.

Se ha querido concluir este apartado con el futuro desarrollo que más atractivo resulta al autor de esta tesis: el diseño de un espectrómetro de ruido a frecuencia de microondas basado en el sistema experimental que se ha desarrollado y utilizado en esta tesis. Este espectrómetro utilizaría distintos componentes del

sistema de la figura 4.1, que permiten realizar medidas en bandas de frecuencia considerablemente amplias: la red de polarización y la fuente de ruido funcionan desde 100 MHz hasta 18 GHz, y con el radiómetro se pueden hacer medidas de ruido desde 10 MHz hasta 26 GHz, si se disponen de mezcladores externos.

La utilización de un sistema de medida a distintas frecuencias permitiría una identificación de constantes de tiempo asociadas a defectos de fabricación en semiconductores y dispositivos diseñados para aplicaciones de bajo ruido.

APÉNDICE I

**INTEGRACIÓN DE LAS PROBABILIDADES DE
DISPERSIÓN POR FONONES ÓPTICOS
POLARES CON APANTALLAMIENTO EN
CONDICIONES DE NO EQUILIBRIO Y
CORRECCIONES DE NO PARABOLICIDAD**

Para caracterizar un mecanismo de dispersión determinado es preciso obtener la razón de dispersión correspondiente y la probabilidad de dispersión en función del ángulo formado por los vectores de onda del portador antes (\mathbf{k}) y después (\mathbf{k}') de la colisión. Ambas funciones se calculan integrando la probabilidad de transición de estados $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ a todos los posibles estados finales \mathbf{k}' . En el caso de los fonones apantallados, esta integral es [1]

$$P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi e^2 \omega q^2}{\Omega(\bar{q}^2 + \beta^2)^2} (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s) G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[\begin{matrix} N_q \\ N_q + 1 \end{matrix} \right] \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'} \mp \hbar\omega) \quad (\text{A.1})$$

siendo q el momento del fonón, Ω el volumen del cristal, ϵ_s la permitividad estática, ϵ_∞ la permitividad óptica, $G(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ el factor de superposición, N_q el factor de Bose-Einstein y β el factor de apantallamiento. Si se produce absorción de un fonón, la probabilidad es proporcional a N_q , mientras que si se produce una emisión debe emplearse $N_q + 1$. En el simulador desarrollado para esta tesis se ha utilizado el factor de superposición calculado por Fawcett, Boardman y Schwain [32], válido para materiales isotrópicos;

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{[\sqrt{(1 + \alpha E)(1 + \alpha E')} + \alpha \sqrt{EE'} \cos \theta]^2}{(1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha E')} \quad (\text{A.2})$$

siendo E , E' las energías del portador antes y después de la colisión, α el coeficiente de no parabolicidad del valle y θ el ángulo formado por los vectores de onda del portador antes y después de la colisión.

En los procesos de conducción usuales puede considerarse que la población de fonones está en equilibrio, y por tanto

$$N_q = \frac{1}{1 + \exp(\hbar\omega / k_B T)} \quad (\text{A.3})$$

Por otra parte, la degeneración del gas de electrones no permite utilizar el factor de apantallamiento clásico propuesto en el modelo de Brooks-Herring. En su lugar debe utilizarse el factor de Thomas-Fermi, cuyo cálculo ya ha sido descrito en el capítulo dedicado a la simulación autoconsistente. Una vez conocida la probabilidad de transición de estados, la razón de dispersión se obtiene integrando $P(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ a todos los posibles estados finales \mathbf{k}' ,

$$\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int P(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d\mathbf{k}' \quad (\text{A.4})$$

La forma más sencilla de calcular esta integral consiste en utilizar el sistema de coordenadas esféricas, tal y como se hace usualmente. En este sistema la integración en ϕ es inmediata,

$$\lambda(\mathbf{k}) = \frac{e^2 \omega (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s)}{-4\pi} \left[\frac{N_q}{N_q + 1} \right] \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{q^2 G(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{(q^2 + \beta^2)^2} \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'} \mp \hbar\omega) k'^2 dk' \sin\theta d\theta \quad (\text{A.5})$$

El vector de onda del fonón puede sustituirse en función de \mathbf{k}' y θ aplicando el principio de conservación del momento,

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q} \Rightarrow q^2 = k'^2 + k^2 - 2\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k} \cos\theta \quad (\text{A.6})$$

haciendo uso de la relación E-k en valles no parabólicos,

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = E(1 + \alpha E) \quad (\text{A.7})$$

y sustituyendo q^2 en función de \mathbf{k}' y \mathbf{k} se obtiene

$$\lambda(k) = K_I \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{k'^2 + k^2 - 2k'k \cos\theta}{(k'^2 + k^2 - 2k'k \cos\theta + \beta^2)^2} G(k, k') \delta(E_k - E_{k'} \mp \hbar\omega) \sqrt{E'} dE' \sin\theta d\theta \quad (\text{A.8})$$

siendo

$$K_I = e^2 \omega (1/\epsilon_s - 1/\epsilon_\infty) \left[\frac{N_q}{N_q + 1} \right] \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi\hbar^3} \quad (\text{A.9})$$

Definiendo los factores

$$\gamma = E(1 + \alpha E) ; \gamma' = E'(1 + \alpha E') \quad (\text{A.10})$$

se obtiene

$$\lambda(k) = \frac{K_I}{k^2} \int_0^\pi \int_0^\infty \frac{1 + \gamma'/\gamma + 2\sqrt{\gamma'\gamma} \cos\theta}{0.1 + \gamma'/\gamma + 2\sqrt{\gamma'\gamma} \cos\theta + \beta^2/k^2} G(k, k') \delta(E_k - E_{k'} \mp \hbar\omega) \sqrt{E'} dE' \sin\theta d\theta \quad (\text{A.11})$$

La integral impropia no representa dificultades gracias al principio de conservación de la energía, impuesto a través de la delta de Dirac. Sustituyendo el factor de superposición y aplicando la delta de Dirac ya puede obtenerse directamente la probabilidad de dispersión angular $P(k, \theta)$. En efecto, teniendo en cuenta que

$$\lambda(k) = \int_0^\pi P(k, \theta) d\theta \quad (\text{A.12})$$

resulta

$$P(k, \theta) d\theta = \frac{K_I}{k^2} G(E, E \pm \hbar\omega) \sqrt{E \pm \hbar\omega} \frac{1 + \gamma' \gamma + 2\sqrt{\gamma' \gamma} \cos\theta}{1 + \gamma' \gamma + 2\sqrt{\gamma' \gamma} \cos\theta + \beta^2 / k^2} \sin\theta d\theta \quad (A.13)$$

donde γ' adopta esta vez los valores discretos impuestos por la integración de la delta de Dirac,

$$\gamma' = (E \pm \hbar\omega) + \alpha(E \pm \hbar\omega)^2 \quad (A.14)$$

Haciendo el cambio de variable $x = \cos\theta$,

$$\lambda(k) = K_{II} \int_{-1}^1 \frac{(A - Bx)(C + Dx)^2}{(J - Bx)^2} dx \quad (A.15)$$

siendo

$$K_{II} = \frac{e^2 \omega \sqrt{2m(E \pm \hbar\omega)} (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_s)}{8\pi \hbar \gamma (1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha(E \pm \hbar\omega))} \left[\frac{N_q}{N_q + 1} \right]; \quad A = 1 + \gamma/\gamma'; \quad B = 2\sqrt{\gamma/\gamma'} \quad (A.16)$$

$$C = \sqrt{\frac{\gamma\gamma'}{E(E \pm \hbar\omega)}}; \quad D = \alpha\sqrt{E(E \pm \hbar\omega)}; \quad J = A + (\beta/k)^2 \quad (A.17)$$

La solución analítica de esta integral tiene un elevado número de términos, y por tanto es aconsejable emplear un programa de cálculo simbólico para resolverla. Reagrupando términos en la solución final dada por el programa MATHCAD se obtiene finalmente

$$\lambda(k) = \frac{T_{J-B} \ln(J - B) + T_{J+B} \ln(J + B) + T_1}{B^3 (J - B)(J + B)} \quad (A.18)$$

donde

$$T_{J-B} = -B^2C^2J^2 + B^4C^2 + 2AD^2J^3 + 2ABCDJ^2 + 3B^2D^2J^2 - 2AB^3CD + 4B^3CDJ - 4BCDJ^3 - 2AB^2D^2J - 3D^2J^4 \quad (A.19)$$

$$T_{J+B} = 4BCDJ^3 - 2ABCDJ^2 + B^2C^2J^2 + 2AB^3CD - B^4C^2 + 3D^2J^4 + 2AB^2D^2J - 2AD^2J^3 - 4B^3CDJ - 3B^2D^2J^2 \quad (A.20)$$

$$T_I = -6BD^2J^3 + 4ABD^2J^2 + 4B^3D^2J - 2AB^3D^2 + 4AB^2CDJ - 2B^3C^2J - 8B^2CDJ^2 + 2AB^3C^2 + 4B^4CD \quad (A.21)$$

Los ángulos de dispersión del vector de onda en cada colisión se calculan generando números aleatorios que se distribuyen según la función de probabilidad de dispersión angular obtenida anteriormente. El método denominado "directo" relaciona el valor del ángulo buscado, θ , con un número aleatorio generado uniformemente entre 1 y 0, r , según la expresión

$$r = \frac{\int_0^\theta P(\theta) d\theta}{\int_0^\pi P(\theta) d\theta} \quad (A.22)$$

Debido a la complejidad de la función P obtenida en este caso, no es posible realizar las integrales y despejar después el valor de θ . Sin embargo, es posible aplicar la fórmula del método directo si se encuentra una función más sencilla, $P'(\theta)$ que satisfaga el siguiente requisito:

$$\exists K \text{ real tal que } KP'(\theta) > P(\theta) \quad \forall \theta$$

Si se encuentra P' , el valor de θ se obtendría siguiendo los siguientes pasos

1. Generar un número aleatorio r' distribuido uniformemente entre 1 y 0
2. Utilizar el método directo para obtener un valor de θ que obedezca la distribución P'
3. Repetir los dos pasos anteriores hasta conseguir que $r' P'(\theta) < P(\theta)$
4. Si se satisface la condición anterior, el valor de θ obedece también la distribución P , en caso contrario hay que repetir el proceso.

La función $P'(\theta)$ debe ser suficientemente sencilla, de modo que su integral permita despejar el valor de θ en la expresión del método directo. Asimismo, es deseable que la diferencia entre P y P' sea lo más pequeña posible con objeto de que no sea necesario generar demasiados números aleatorios para dar con un valor de θ válido. Cumplir este requisito es complicado, puesto que debe satisfacerse para todos los valores de la energía que pueda tener el portador durante la simulación. No obstante existen distintas formas obvias de simplificar la función $P(\theta)$ a una función mayor y más sencilla. Basta con sustituir alguno de los cosenos por 1 o -1, en función de su localización dentro de la fórmula. Después de probar todas las posibilidades se ha podido comprobar que la función que más adecuada a los requisitos impuestos es:

$$P'(\theta) = K \frac{(A - B \cos \theta)(C + D)^2}{(J - B \cos \theta)^2} \quad (\text{A.23})$$

Aplicando a P' el método directo y calculando la integral se obtiene una expresión en la que θ puede determinarse mediante cualquier algoritmo de resolución de ecuaciones no lineales,

$$\ln(J - B \cos \theta) + \frac{A'}{J - B \cos \theta} = B' \quad (\text{A.24})$$

siendo

$$A' = J - A$$

$$B' = r \left[\ln \left(\frac{J+B}{J-B} \right) + A' \left\{ \frac{1}{J+B} - \frac{1}{J-B} \right\} \right] + \ln(J-B) + \frac{A'}{J-B} \quad (\text{A.25})$$

APENDICE II

NOISEM2: APLICACIÓN PARA EL CONTROL DEL MEDIDOR DE RUIDO

NOISEM2 ha sido desarrollado en Visual Basic para realizar medidas de ruido en alta frecuencia de dispositivos de 1 y 2 puertas, mediante el control de un medidor de ruido modelo HP 8970.

El programa permite realizar medidas de la temperatura de ruido y el módulo del coeficiente de reflexión en dispositivos de una puerta, así como la temperatura de ruido y la ganancia disponible en dispositivos de dos puertas. Para la comunicación con el instrumento se puede utilizar cualquier tarjeta de adquisición que sea compatible bien con los protocolos HP-IB o bien con los de National Instruments. **NOISEM2** funciona almacenando en una tabla los datos que captura del medidor, tal y como se muestra en la figura AII-1. La compatibilidad con los comandos Copiar y Pegar del entorno Windows permite transferir las medidas a cualquier aplicación usual de este sistema operativo. Los resultados también pueden almacenarse en un fichero de texto.

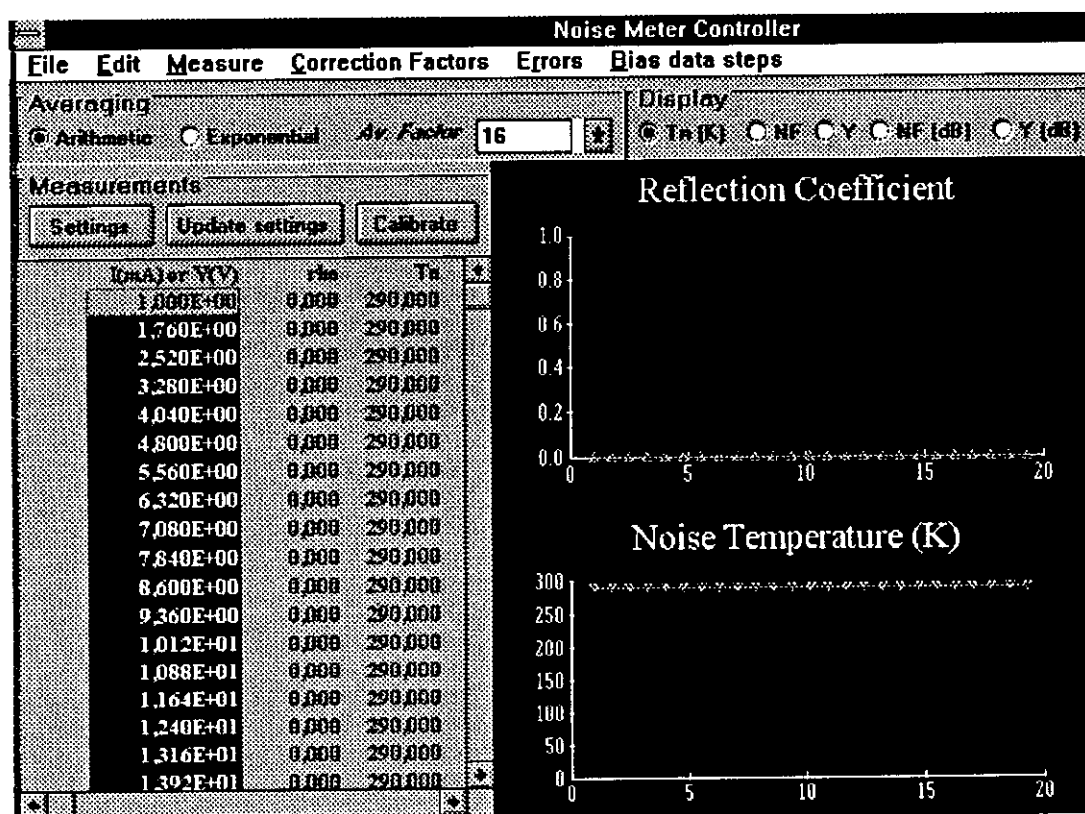


Figura AII-1. Ventana principal de NOISEM2

La opción **Settings** permite seleccionar distintos parámetros de la configuración, tal y como se muestra en la figura AII-2. Los cambios pueden hacerse activos en cualquier instante posterior del sistema de medida, mediante la selección de la opción **Update**. El proceso de medida comienza especificando el medidor de ruido que se va a utilizar entre los dos modelos posibles,

HP8970B (medidas hasta 1.6 GHz)

HP8970S (medidas hasta 18 GHz)

Settings

Noise Meter Type: HP8970B

Card Interface Select Code: 0

Noise Meter Address: 8

Coupling losses [dB]: 0

Room Temperature [K]: 301

Frequency Range (MHz):

Start: 1400 Stop: 1600 Step: 25 Set to: 1500

Bias Range (I or V, and any unit):

Start: 1 Stop: 20 Points: 25

OK Cancel

Figura AII-2. Ventana de la opción "Settings" de NOISEM2

A continuación se selecciona el código de la tarjeta utilizada, que típicamente es 0 para las tarjetas compatibles con NI o 7 para las compatibles con HP, y la dirección GPIB del medidor de ruido.

Si se desea utilizar un acoplo disipativo en una medida de dispositivos de una puerta (recomendable para diodos o cargas altamente reflectivas) debe especificarse el factor de atenuación en dB (positivo) del elemento de acoplo en el recuadro

"Coupling losses". En el recuadro "Room Temperature" se debe especificar la temperatura física a la que se encuentra la fuente de ruido. Finalmente se indican los rangos de frecuencia y polarización en los que se desea realizar la medida.

Para hacer la medida de un dispositivo de dos puertas basta con conectar la fuente a la entrada del medidor. A continuación se debe realizar la calibración, seleccionando el comando **Calibrate** de la pantalla principal. Una vez terminada la calibración basta con insertar el dispositivo entre la fuente y el medidor y seleccionar la opción **2-port** del submenú **Measure**. Es preciso tener en cuenta que la medida de la temperatura de ruido asume que el dispositivo está acoplado.

La medida de una puerta se realiza a través de los pasos siguientes

- 1) Conectar una carga patrón (cortocircuito) en el plano de carga del dispositivo y calibrar con la opción **Calibrate**.
- 2) Conectar el dispositivo y realizar una medida de la potencia en caliente calibrada mediante la opción **Phcal** del menú **Measure**. Si el elemento de acoplo es reactivo ajustar las ramas del sintonizador para minimizar este valor, y repetir la calibración.
- 3) Realizar la medida en función de la frecuencia o de la polarización, mediante las opciones **Tn(I)a** o **Tn(I)b**, respectivamente, del menú **Measure**.

Si se desea corregir los errores cometidos por las pérdidas de la red de polarización y el circulador, basta con crear un fichero de texto en el directorio de trabajo con el siguiente formato

Frec. inicial (MHz)

Frec. Final (MHz)

Paso (MHz)

A (a la frecuencia inicial)

A (a frec. inicial + paso)

A (a frec. Inicial +2*paso)

....

A (a frec. Final)

Este fichero puede ser leído por el programa en cualquier instante de la simulación, utilizando la opción **Read A_{12B}** en el menu de **File**.

Si no se disponen de los valores de este factor de pérdidas puede utilizarse la opción **Estimate A_{12B} from Short** del menu **Correction factors**.

Una vez realizada la calibración es posible refinar la estimación de la temperatura de ruido utilizando el propio dispositivo en equilibrio térmico. Para ello basta con conectar el dispositivo asegurándose de que no se le está aplicando ninguna polarización, y seleccionar la opción **Correct Calibrated Powers from DUT** del menu **Correction Factors**. Esta corrección debe realizarse después de la calibración y está restringida a aquellos casos en los que el dispositivo se encuentra a una temperatura física igual a la de la fuente de ruido. Con esta información el programa asume que debe calcular una temperatura de ruido igual a la temperatura de la fuente, y reescala las potencias medidas para obtener esta temperatura.

APENDICE III

COMUNICACIONES CON OTROS INVESTIGADORES

En este apartado se recogen extractos claves de dos de las comunicaciones personales más importantes que se han intercambiado con distintos investigadores de otros centros, que actualmente trabajan en temas afines a los tratados en esta tesis. Estas comunicaciones fueron fuente de valiosas sugerencias para el desarrollo y continuación de este trabajo. En cursiva se describe la cuestión respondida por cada investigador, así como algunas aclaraciones.

W. T. Masselink, Septiembre 96

Dear Dr. Miranda,

Thank you for your interest in my velocity measurements. I'll try to answer the questions related to the publication in Semiconductor Science and Technology entitled "Electron velocity in GaAs: bulk and selectively doped heterostructures".

>1. In connection with the velocities measured at both 300 K and 77 K, it seems that there are >two different curves for the same doping concentration, 10^{15} cm^{-3} . The same applies to 10^{18} . >The curves coincide at low fields, but they separate from each other at higher fields. The separation is particularly important for the measurements at 77 K with the 10^{15} cm^{-3} sample. What is the difference between the measurements?

These were different samples and were included to give an idea of the accuracy (or inaccuracy) of the measurements. Most are essentially the same, but on Fig. 5 there is a good deal of discrepancy for the 10^{15} samples. I trust the lower curve based on other measurements.

>2. Is there any difficulty in making measurements at fields larger than 9 KV/cm?

At the time I made these measurements, yes. The magnetron was limited to about 10 kW which translates into a peak field of not much higher than 9 kV/cm. In the meanwhile I have bought a bigger one which should allow about a

factor of 1.4 higher (root 2). I'm also in the process of revising the experiment to allow the study of micron-sized samples instead of mm-sized ones and also in a cryostat and in a magnet field. Plus still higher fields. Please let me know if you have further questions or comments.

Sincerely,

Prof. W. Ted Masselink
Humboldt University in Berlin
Department of Physics
Invalidenstr. 110
10115 Berlin

M. Fischetti, Septiembre 96

Esta comunicación fue recibida como respuesta a un mensaje que se envió para consultar la aclaración de algunos detalles sobre la simulación autoconsistente de materiales degenerados. En esta fecha se había depurado la inclusión de los efectos de acoplo entre fonones y plasmones tal y como se describe en el capítulo dedicado a la simulación autoconsistente. Sin embargo, no se había depurado aún la corrección del Principio de Exclusión de Pauli, y las simulaciones no eran capaces de reproducir con precisión las curvas v-F experimentales publicadas por Masselink. Las sugerencias descritas en este mensaje permitieron depurar finalmente este refinamiento. Asimismo, también se incluyen comentarios sobre los modelos de impurezas ionizadas. En la fecha de este mensaje aún se utilizaba el modelo de Brooks-Herring.

Dear Jose Miguel,

An overall comment: The experimental data you (and I) have used, are related to undoped materials [*El Dr. Fischetti no conocía las curvas de Masselink*]. This is where my knowledge ends. High-doping effects in polar materials are really tough....

1. The FD correction is obviously OK, but you should not counted twice. If you use an FD distribution for the carriers, and degeneracy corrections during the MC (I know you do not do it, but you should, see below), then this correction is included already. In addition, the FD correction will apply to the Gamma valley, but not to the L valley, where either the density is low (and the DOS mass is higher), or the field is high, so that a high temperature (yes! emphatically yes: it's the electron temperature that matters!) limit (nondegenerate) applies.
2. In order to account for degeneracy, we use a rejection on the final energy. This assumes complete isotropy, which is OK beyond the regime of streaming motion. Use nondegenerate scattering rates. Select a final state of energy E_f . Accept the collision only with probability $1-f(E_f)$, where $f(E)$ is the FD function at the electron temperature. To find the electron temperature, in the nondegenerate limit it's simply $T_e = (2/3)E_{ave}/k_B$. In the degenerate limit, we solve self-consistently, via look-up tables, the problem

$$E_{ave} = \text{integral } dE E f(E)$$

$$n = \text{integral } dE \text{DOS}(E) f(E)$$

where E_{ave} and n are the (known) average energy and electron density, and the Fermi level E_F and electron temperature T_e are the unknowns. T_e can also be used in the expression for the screening parameter.

3. The Brooks-Herring expression leaves much to be desired at high doping ($1e17$ and higher): It results in overestimated mobilities at high doping. Herb Bennett and Charly Lowney have published lots of papers about the use of the phase-shift analysis to deal with it. Since the Lowney-Bennett approach is hard to implement in MC codes, we have used a parabolic-band approximation (impurity scattering matters at low energies anyway), the phase-shift correction tables published by Mayer and Bartoli (please, let me know if you need the references and I

will look for them), the correction to the screening parameters required by Friedel's sum rule. This approach works very nicely even up to $1e20$ for electrons in Si. According to Lowney and Bennet, it should work also in GaAs.

Good luck!

M. Fischetti
IBM Watson Research Center
PO BOX 218. Yorktown Heights, 10598
NY, USA

APENDICE IV

MC37: SIMULACIÓN DEL RUIDO EN GAAs

La aplicación MC37 ha sido implementada para la simulación del ruido en una muestra de material homogéneo de GaAs. El código fuente se ha desarrollado en lenguaje C, y ha podido ser compilado sin ninguna modificación en distintos ordenadores. La tabla A-IV muestra las máquinas, compiladores y sistemas operativos en los que se ha comprobado el correcto funcionamiento de MC37.

ORDENADOR	SISTEMA OPERATIVO	COMPILADOR
VMS ALPHA	OPEN VMS	CXX
ALPHA TURBO LASER	DIGITAL UNIX	CC
IBM RISC/6000	AIX 3.0	GNU C
SUN SPARC STATION	UNIX	CC
PC	WINDOWS 95	Visual C++
PC	LINUX	GNU C

Tabla A-IV.1. Ordenadores en los que se ha compilado y ejecutado MC37 sin necesidad de modificar el código.

La ejecución del programa se puede realizar en línea de comandos con o sin argumento. La sintaxis es **mc37.out <nombre_fichero_de_entrada>**.

El formato del fichero de entrada se puede observar en la figura A-IV.1. Cada línea con entrada de datos dispone de comentarios aclaratorios, que pueden modificarse arbitrariamente con tal de que no incluyan espacios entre caracteres. La primera parte del fichero está centrada en la especificación de las muestras que se desean simular, el rango de campos para los que se deseen realizar los cálculos y los parámetros de muestreo. Es posible realizar distintas simulaciones sucesivas en una sólo ejecución del programa con objeto de facilitar la obtención de resultados para distintos dopados y temperaturas. Cada simulación tiene asociada una línea del fichero en donde se especifican los dopados y temperaturas, así como el nombre del fichero para los datos de salida.

Finalmente se puede especificar con la variable "SelfConsistentUpdates" si se desea realizar una actualización periódica de las probabilidades de dispersión con la temperatura de los electrones que se obtenga durante la simulación, lo cual debe hacerse en el caso de un material degenerado.

En la sección "SCATTERING_RATE_MODELS" existen distintas opciones para personalizar los modelos físicos de los mecanismos de dispersión. La primera variable permite especificar el modelo de dispersión por impurezas ionizadas (0=despreciar dispersión por impurezas, 1=modelo de Conwell-Weisskopf, 2=modelo

```

NumOfSamplesToSimulate 3
Doping(cm-3)_T(K)_OutF_name 1.0e15 300 out1.dat
Doping(cm-3)_T(K)_OutF_name 1.0e15 77 out2.dat
Doping(cm-3)_T(K)_OutF_name 1.0e16 300 out3.dat
Field_Range(kV/cm)[Start,stop,step] 0.5 10 0.5
Time_intervals?delta_t(s)? 10000000 5e-15
SelfConsistentUpdates 0
*****SCATTERING_RATE_MODELS*****
Impurity_model? 1 Intervalley? 1
Acoustic? 1 Plasmons? 0
Piezoelectric? 1 Screened_ph? 0
Correct_screen? 0 Correct_Hot_e? 0
Hybrid_PH_PL? 0 Pauli? 0
*****NOISE_CALCULATION*****
Noise_Model? 2
StarttopromediateNoiseat... 0
Numofsubintervalstopromediate 2500
Nsampling 8192
Window?_Startat...(s) 2.2E-12
IntegratewithFFT? 0
NumofMEMPoles 150
Spectrum_resolution(Hz) 10e9
MaximumSpectrumFreq(Hz) 500e9
*****ENERGY_INTERVALS*****
E_range(eV) 1.0e-7 1.0 1.0e-4
G_VALLEY .01 .1 .2 .4 .6 .8
L_VALLEY .01 .1 .2 .4 .6 .8
X_VALLEY .01 .1 .2 .4 .6 .8
Optimize_Eintervals? 1

```

Figura A-IV.1. Fichero de entrada para el simulador MC37.

de Brooks-Herring). Después se selecciona si se desean simular los valles satélites (1=SI, 0=NO) con "Intervalley". Las variables "Acoustic", "Piezoelectric" y "Plasmons" permiten especificar si se desea o no utilizar la interacción por fonones acústicos, la interacción piezoeléctrica y la interacción por plasmones, respectivamente. Con "Screened_ph" se selecciona si se deben considerar los efectos de apantallamiento de fonones. Si "Correct_screen" se hace igual a 0, el factor de apantallamiento utilizado se obtiene a partir de la estadística de Maxwell-Boltzmann, y si se hace igual a 1 se utiliza el factor de Thomas-Fermi.

La variable "Correct_hot_e" permite especificar si se desea utilizar la temperatura de los electrones en el cálculo del factor de apantallamiento. Si "Correct_hot_e" se hace 0 se utiliza la temperatura de la red para calcular los factores de apantallamiento. "Hybrid_PH_PL" permite especificar si se desean considerar los acoplos de los fonones y plasmones. Finalmente "Pauli" indica si se debe incluir el Principio de Exclusión.

En el bloque "NOISE_CALCULATION" se especifican los parámetros para las estimaciones espectrales. La variable "Noise_model" se emplea para indicar el tipo de estimación que debe utilizarse en el simulador (0=no realizar simulación de ruido, 1=Aplicación directa del teorema de Wiener-Khintchine calculando la función de autocorrelación con el algoritmo de Brunetti-Jacoboni, 2=Aplicación directa del teorema de Wiener-Khintchine calculando la función de autocorrelación con una transformada rápida doble, y 3=Método de Máxima Entropía). A continuación se especifican los intervalos que deben simularse antes de comenzar a calcular los espectros de ruido (variable "StarttopromediateNoiseat...").

Cuando se utiliza el método autoconsistente se ha comprobado que la convergencia se obtiene con mayor rapidez si se calculan del orden de 2 a 3 millones de velocidades instantáneas con unas 100-200 actualizaciones de la temperatura electrónica antes de comenzar la simulación del ruido, con objeto de que esta temperatura se aproxime a su valor final. Posteriormente se especifican los subintervalos de velocidades que deben promediarse (N', según la nomenclatura utilizada en el capítulo 2). Con la variable Nsampling se especifica la longitud de cada subintervalo (N). Si se asigna a "Noise_model" el valor de 2, "Nsampling" debe ser

necesariamente una potencia entera de 2. Los valores de N y N' especificados en este bloque sustituyen a la variable "Time_intervals" del primer bloque, la cual se utiliza únicamente cuando no se realizan simulaciones de ruido ("Noise_model"=0).

La variable "Window" permite indicar el tipo de función moduladora a emplear en la aplicación de una ventana o taper (0=no aplicar modulación, 1=Bartlett, 2=Hann, 3=Welch). Con la variable "Startat...(s)" se especifica el tiempo a partir del cual se debe aplicar la función moduladora a la función de autocorrelación. La rutina a utilizar en la integración de la función de autocorrelación se puede seleccionar con la variable "IntegratewithFFT?" (0=integración por la regla de los trapecios, 1=integración con la transformada discreta rápida). En caso de que se asigne a esta variable el valor de 1, "Nsampling" debe ser necesariamente una potencia entera de 2. Cuando se selecciona el método de Máxima Entropía, se utiliza la variable "NumofMEMpoles" para especificar el número de polos en el desarrollo autorregresivo. Con "Spectrum_resolution(Hz)" y "MaximumSpectrumfreq(Hz)" se puede especificar la resolución del espectro y la máxima frecuencia a la cual debe calcularse el mismo, respectivamente.

Finalmente, en el bloque "ENERGY_INTERVALS" se especifica el rango de energías al cual deben calcularse las probabilidades de dispersión, así como los valores iniciales de los intervalos de energía a optimizar en cada uno de los valles.

El código del programa se ha estructurado en 3 ficheros, que acumulan el cuerpo principal del programa ("mc37.c"), las funciones numéricas básicas tales como la generación de aleatorios, integración, optimización y la estimación espectral ("numunix.h"), y las funciones subsidiarias como son las del cálculo del vector de onda, las probabilidades de dispersión, el factor de apantallamiento o la duración de las trayectorias ("physics.h"). Los bloques principales del código se muestran en la figura A-IV.2.

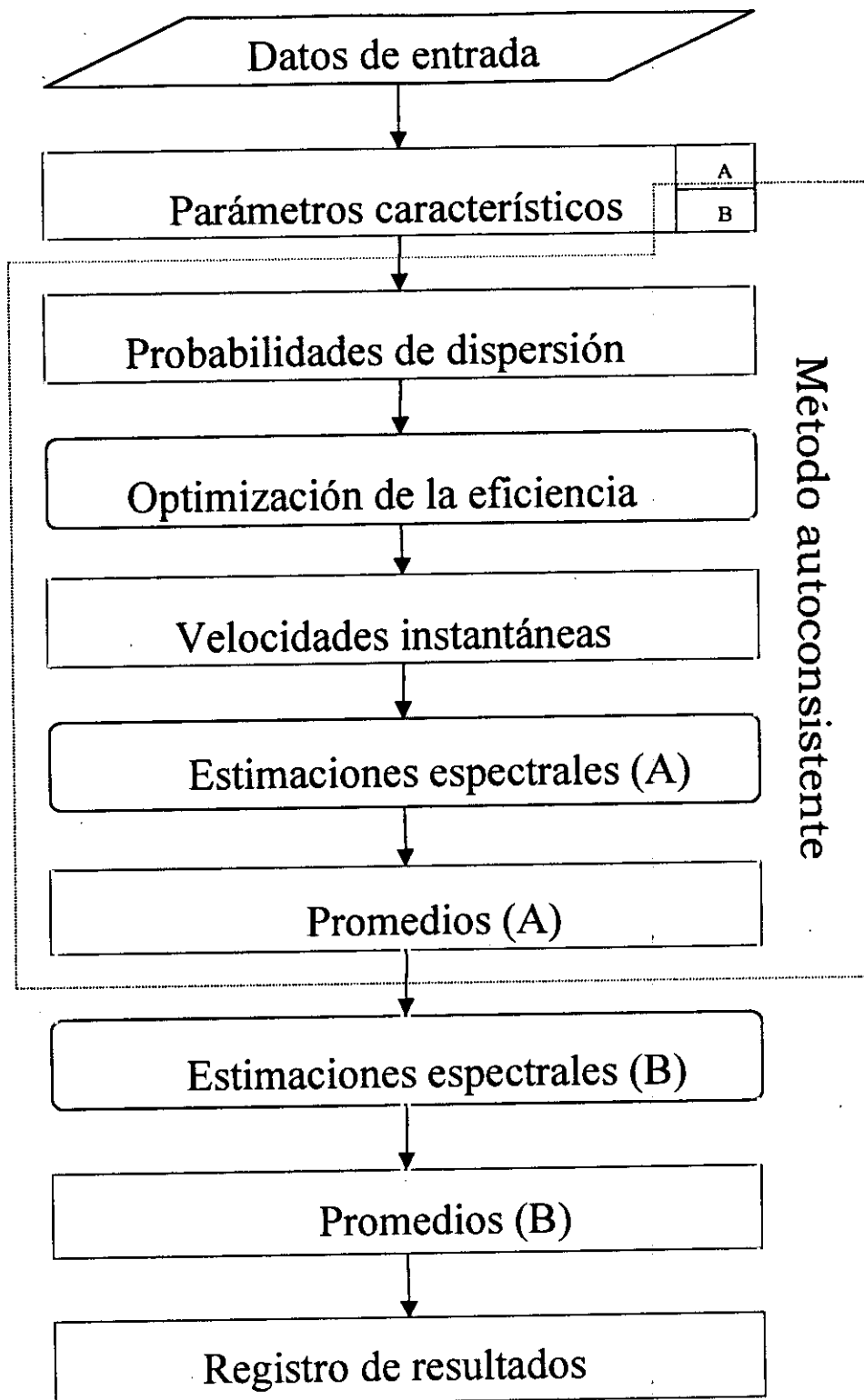


Figura A-IV.2. Bloques principales de código en el simulador MC37.

El bloque de cálculo de parámetros característicos se estructura en dos funciones. En la primera se calculan los parámetros que no dependen de la temperatura de los electrones, y se almacenan en variables auxiliares todos aquellos factores que agrupan las multiplicaciones de los parámetros independientes de la energía instantánea y de la energía media y que son utilizados en las funciones de cálculo más frecuentemente invocadas, como son las funciones de probabilidades de dispersión de cada mecanismo, las del cálculo del vector de onda y energía instantáneas, duración de las trayectorias, etc. De esta forma se minimiza considerablemente el total de multiplicaciones en cada simulación.

El segundo bloque de parámetros característicos se dedica al cálculo de todos los factores que dependen de la temperatura de los electrones, como son las integrales de Fermi, los factores de apantallamiento, las constantes de corte de los modos híbridos, etc. También se calculan en este segundo bloque todas las multiplicaciones de factores que dependen únicamente de la temperatura de los electrones, y se almacenan en variables subsidiarias. Este segundo bloque es el punto de partida del bucle que encierra el método autoconsistente.

Una vez determinados todos los parámetros característicos, se calculan las probabilidades de dispersión en el rango de energías especificado en el fichero de entrada. Posteriormente se realiza la optimización de los intervalos de energía y se calculan los factores Γ_i , tal y como se ha descrito en el capítulo I.

El bloque de cálculo de velocidades instantáneas, ya descrito en el primer capítulo (véase apartado I.2), se aloja en el fichero del cuerpo principal del programa; e invoca al bloque de estimación espectral con frecuencia N' . Los resultados de la estimación se almacenan en variables acumulativas con dimensión N , minimizándose así la cantidad de memoria necesaria para ejecutar el programa. Si se selecciona el método de Máxima Entropía, los coeficientes de predicción se obtienen dentro del bucle del método autoconsistente (bloque de estimación espectral A). En caso contrario es la función de autocorrelación de fluctuaciones de velocidad la que se calcula.

El método autoconsistente se finaliza determinando todos los valores medios que se necesitan para la actualización de los factores de apantallamiento (energías de

Fermi efectivas y temperaturas electrónicas). La densidad espectral de fluctuaciones de velocidad se calcula en todos los casos al final de la simulación. En el bloque de estimación espectral que se encuentra fuera del método autoconsistente se integra la función de autocorrelación ya promediada si la estimación seleccionada no es el método de Máxima Entropía, y si lo es se calcula el desarrollo autorregresivo con los coeficientes de predicción promediados.

REFERENCIAS

- [1] C. Jacoboni, P. Lugli, *"The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation"*, Computational Microelectronics Series, Springer Verlag, 1989.
- [2] K. Tomizawa, *"Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices"*, Artech House, 1993.
- [3] M. Shur, *"Physics of Semiconductor Devices"*, Prentice Hall Series in Solid State Physical Electronics, 1990.
- [4] W. H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W. T. Vetterling, *"Numerical Recipes in C"*, Cambridge University Press, 2^a ed. 1995.
- [5] M. A. Littlejohn, J.R. Hauser, T.H. Glisson, *"Velocity-field characteristics of GaAs with Γ_6 - L_6 - X_6 conduction band ordering"*, Journal of Applied Physics 48, pgs. 4587-4590, 1977.
- [6] T. Wang, K. Hess, *"Calculation of electron velocity distribution in high electron mobility transistors using an ensemble Monte Carlo method"*, Journal of Applied Physics 57, pgs. 5336-5344, 1985.
- [7] M. V. Fischetti, S.E. Laux, *"Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space charge effects"*, Physical Review B 38(14), pgs. 9721-9745, 1988.
- [8] H. Brooks, C. Herring, *"Scattering by ionized impurities in semiconductors"*, Physical Review 83, pgs 879-885, 1950
- [9] E. Conwell, V. F. Weisskopf, *"Theory of impurity scattering in semiconductors"*, Physical Review 77 (3), pgs. 388-393, 1950
- [10] D. Chattopadhyay, H.J. Queisser, *"Electron Scattering by Ionized Impurities in Semiconductors"*, Review of Modern Physics 53 (4), Part I, pgs. 745-768, 1981.

- [11] J. G. Ruch, W. Fawcett, *"Temperature dependence of the transport properties of GaAs determined by a Monte Carlo method"*, Journal of Applied Physics 41, pgs. 3843-3849, 1970.
- [12] Massimo V. Fischetti, *"Monte Carlo Simulation of Transport in Technologically Significant Semiconductors of the Diamond and Zinc-Blende Structures-Part I: Homogeneous Transport"*, IEEE Trans on Electron Devices, 38 (3), pgs. 634-649, 1991.
- [13] J. S. Blakemore, *"Semiconducting and other major properties of gallium arsenide"*, Journal of Applied Physics 53 (10), pgs. R123-R179, 1982
- [14] S. Zollner, S. Gopalan, M. Cardona, *"Intervalley deformation potentials and scattering rates in zinc blende semiconductors"*, Applied Physics Letters 54 (7), pgs. 614-616, 1989.
- [15] S. Zollner, S. Gopalan, M. Cardona, *"Microscopic theory of intervalley scattering in GaAs: k dependence of deformation potentials and scattering rates"*, Journal of Applied Physics 68 (4), pgs. 1682-1693, 1990.
- [16] S. Krishnamurthy, M. Cardona, *"Self-consistent calculation of intervalley deformation potentials in GaAs and Ge"*, Journal of Applied Physics 74 (3), pgs. 2117-2119, 1993.
- [17] J. Wang, Z.Q. Gu, M. Li, W. Lai, *"Intervalley Γ -X deformation potentials in III-V zinc-blende semiconductors by ab initio pseudopotential calculations"*, Physical Review B 46 (19), pgs. 12358-12364, 1992.
- [18] W. Hackenberg, G. Fasol, *"Polar optic phonon and Γ -L intervalley scattering times in GaAs from steady state hot electron luminescence spectroscopy"*, Applied Physics Letters 57(2), pgs. 174-176, 1990.

- [19] J.A. Kash, *"Hot electron luminiscence: A comparison of GaAs and InP"*, Physical Review B, vol 47(3), pgs. 1221-1226, 1993.
 - [20] C. Jacoboni, L. Reggiani, *"The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials"*, Reviews of Modern Physics 55(3), pgs. 645-705, 1983.
 - [21] R. W. Hockney, J. W. Eastwood, *"Computer Simulation Using Particles"*, McGraw-Hill, Maidenhead, 1981. También publicado por Institut of Physics Publishing, Techno House, Bristol, 1994.
 - [22] R. M. Yorston, *"Free-Flight Time Generation in the Monte Carlo Simulation of Carrier Transport in Semiconductors"*, Journal of Computational Physics 64, pgs. 177-194, 1986.
 - [23] E. Sangiorgi, B. Ricco, F. Venturi, *"MOS2: An efficient Monte Carlo Simulator for MOS Devices"*, IEEE Trans on CAD (7), pgs. 259-271, 1988.
 - [24] A. Cappy, B. Carnez, R. Fauquembergue, G. Salmer, E. Constant, *"Comparative Potential Performance of Si, GaAs, GaInAs, InAs Submicrometer-Gate FET's"*, IEEE Trans on Electron Devices 27 (11), pgs. 2158-2164, 1980.
 - [25] T. González, J. E. Velázquez, P. Gutiérrez, D. Pardo, *"Five valley model for the study of electron transport properties at very high electric fields in GaAs"*, Semiconductor Science and Technology 6, pgs. 862-871, 1991.
 - [26] T. J. Maloney, J. Frey, *"Transient and steady-state electron transport properties of GaAs and InP"*, Journal of Applied Physics 48(2), pgs. 781-787, 1977.
 - [27] J. G. Ruch, G. S. Kino, *"Measurement of the velocity-field characteristic of Gallium Arsenide"*, Applied Physics Letters 10 (2), pgs. 40-42, 1967.
-

- [28] N. Braslau, P. S. Hauge, *"Microwave Measurement of Velocity-Field Characteristic of GaAs"*, IEEE Trans. on Electron Devices 17 (8), pgs. 616-619, 1970.
- [29] W. T. Masselink, *"Electron velocity in GaAs: Bulk and selectively doped heterostructures"*, Semiconductor Science and Technology 4, pgs. 503-512, 1989.
- [30] W. T. Masselink, comunicación personal (véase apéndice III).
- [31] E. Y. Wu, *"Intervalley-scattering effect on the double-peak velocity behavior of electrons in compensated GaAs"*, Physical Review B 44 (7), pgs. 3316-3319, 1991.
- [32] W. Fawcett, A.D. Boardman, S. Swain, *"Monte Carlo determination of electron transport properties in Gallium Arsenide"*, Journal of Physics and Chemistry of Solids 31, pgs. 1963-1990, 1970.
- [33] A. van der Ziel, *"Noise in Solid State Devices and Circuits"*, Wiley Interscience, 1986.
- [34] T. Kuhn, L. Reggiani, L. Varani, V. Mitin, *"Monte Carlo method for the simulation of electronic noise in semiconductors"*, Physical Review B 42 (9), pgs. 5702-5713, 1990.
- [35] L. Varani, L. Reggiani, T. Kuhn, T. González, D. Pardo, *"Microscopic Simulation of Electronic Noise in Semiconductor materials and Devices"*, IEEE Trans. on Electron Devices 41 (11), pgs. 1916-1925, 1994.
- [36] J. G. Adams, T. W. Tang, L. E. Kay, *"Monte Carlo Simulation of Noise in GaAs Semiconductor Devices"*, IEEE Trans. on Electron Devices 41 (4), pgs. 575-581, 1994.

- [37] R. Brunetti, C. Jacoboni, "*Analysis of the stationary and transient autocorrelation function in semiconductors*", Physical Review B 29(10), pgs. 5739-5748, 1984.
- [38] E. Oran Brigham, "*The Fast Fourier Transform*", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1974.
- [39] J. P. Burg, "*Maximum entropy spectral analysis*", Proceedings del 37th Meeting of the Society of Exploration Geophysicist, Oklahoma, 1967.
- [40] J. Makhoul, "*Linear Prediction: A Tutorial Review*", Proceedings of the IEEE 63(4), pgs. 561-580, 1975.
- [41] E.T. Jaynes, "*On the Rationale of Maximum Entropy Methods*", Proceedings of the IEEE 70 (9) pgs. 939-952, 1982.
- [42] S. Haykin, B. W. Currie, S. B. Kesler, "*Maximum-Entropy Spectral Analysis of Radar Clutter*", Proceedings of the IEEE 70 (9) pgs. 953-962, 1982.
- [43] J. M. Miranda, J. L. Sebastián, S. Muñoz, "*Coupled Maximum Entropy - Monte Carlo estimation of microwave, mm-wave and sub mm-wave spectrum of velocity fluctuations in GaAs*", Applied Physics Letters 72 (2), pgs. 1-3, 1998.
- [44] R. O. Grondin, P. A. Blakey, J. R. East, E. D. Rothman, "*Monte Carlo Estimation of Hot Carrier Noise at Millimeter- and Submillimeter-Wave Frequencies*", IEEE Trans. on Electron Devices 28 (8), pgs. 914-923, 1981.
- [45] T. González, D. Pardo, "*Ensemble Monte Carlo with Poisson solver for the study of current fluctuations in homogeneous GaAs structures*", Journal of Applied Physics 73 (11), pgs. 7453-7464, 1993.

- [46] T. González, *"Análisis del ruido electrónico en materiales y dispositivos semiconductores unipolares mediante el metodo de Monte Carlo"*, Tesis doctoral, Universidad de Salamanca 1994.
- [47] Fauquembergue, J. Zimmermann, A. Kaszynski, E. Constant, G. Microondes, *"Diffusion and the power spectral density and correlation function of velocity fluctuations for electrons in Si and GaAs by Monte Carlo methods"*, Journal of Applied Physics 51 (2), pgs. 1065-1071, 1980.
- [48] P. Bordone, L. Reggiani, L. Varani, T. Kuhn, *"Hot phonon effects on noise and diffusion in GaAs"*, Semiconductor Science and Technology 9, pgs. 623-626, 1994.
- [49] V. Bareikis, R. Katilius, A. Matulionis, *"Noise in confined structures of doped semiconductors"*, Proc. of the 12th International Conference on Noise and 1/f Fluctuations, ed. P. H. Handel and A. L. Chung, vol. 285, pgs. 181-186, New York, 1993.
- [50] V. Bareikis, J. Liberis, I. Matulioniene, A. Matulionis, P. Sakalas, *"Experiments on Hot Electron Noise in Semiconductor Materials for High Speed Devices"*, IEEE Trans on Electron Devices 41 (11), pgs. 2050-2060, 1994.
- [51] P. Bordone, L. Varani, L. Reggiani, L. Rota, *"Influence of hot phonons on electronic noise in GaAs"*, Applied Physics Letters 63 (8), pgs. 1107-1109, 1993.
- [52] T. González, J. E. Velázquez, P. M. Gutiérrez, D. Pardo, *"Monte Carlo analysis of the transient spectral density of velocity fluctuations in semiconductors"*, Applied Physics Letters, 60(5), pgs. 613-615, 1992.

- [53] T. González, J. E. Velázquez, P. M. Gutiérrez, D. Pardo, "*Analysis of the transient spectral density of velocity fluctuations in GaAs and InP*", Journal of Applied Physics 72 (6), pgs. 2322-2330, 1992.
- [54] P. Shiktorov, V. Gruzinskis, E. Starikov, L. Reggiani, L. Varani, "*Transit-time effect on electronic noise in submicron n^+nn^+ structures*", Applied Physics Letters 68 (11), pgs. 1516-1518, 1996.
- [55] V. Bareikis, J. Liberis, A. Matulionis, R. Miliusyte, J. Pozela, P. Sakalas, "*Length dependent hot electron noise in doped GaAs*", Solid State Electronics 32 (12) pgs. 1647-1650, 1989.
- [56] L. Varani, P. Houlet, J.C. Vaissiere, J. P. Nougier, E. Starikov, V.Gruzinskis, P. Shiktorov, L. Reggiani, L. Hlou, "*A model noise temperature for nonlinear transport in semiconductors*", Journal of Applied Physics 80 (9), pgs. 5067-5075, 1996.
- [57] J. P. Nougier, "*Fluctuations and Noise of Hot Carriers in Semiconductor Materials and Devices*", IEEE Transactions on Electron Devices 41 (11), pgs. 2034-2049, 1994.
- [58] J. G. Ruch, G.S. Kino, "*Transport Properties of GaAs*", Physical Review 174, pgs. 921-931, 1968.
- [59] V. Bareikis, V. Viktoravichyus, A. Gal'dikas, R. Milyushite, "*Microwave noise and constant of the coupling between the valleys Γ and L in a three valley model of GaAs*", Soviet Physics Semiconductors 14, pgs. 847-848, 1980.
- [60] J. Pozela, A. Reklaitis, "*Electron Transport Properties in GaAs at High Electric Fields*", Solid State Electronics 23, pgs. 927-933, 1980.

- [61] D. Gasquet, M. de Murcia, J. P. Nougier, M. Fadel, *"Noise in Physical Systems and 1/f Noise"*, Ed. A.d'Amico y P. Mazetti, Elsevier, 1985.
- [62] M. de Murcia, D. Gasquet, A. Elamri, J. P. Nougier, J. Vanbreemerssch, *"Diffusion and Noise in GaAs Materials and Devices"*, IEEE Transactions on Electron Devices 38 (11), pgs. 2531-2537, 1991.
- [63] D. Chattopadhyay, H. J. Queisser, *"Electron Scattering by Ionized Impurities in Semiconductors"*, Review of Modern Physics 53 (4), pgs. 745-768, 1981.
- [64] E. Moore, *"Quantum-transport theories and multiple scattering in doped semiconductors. I. Formal theory"*, Physical Review 160 (3), pgs. 607-617, 1967.
- [65] E. Moore, *"Quantum-transport theories and multiple scattering in doped semiconductors. II. Mobility of n-type GaAs"*, Physical Review 160 (3), pgs. 618-626, 1967.
- [66] I. Yanchev, B. G. Arnaudov, S. K. Evtimova, *"Electron mobility in heavily doped gallium arsenide due to scattering by potential fluctuations"*, Journal of Physics C 12, pgs. L765-769, 1979.
- [67] R. Resta, L. Resca, *"Ionized impurity scattering in semiconductors"*, Physical Review B 20 (8), pgs. 3254-3257, 1979.
- [68] L. Scarfone, L. Richardson, *"Electron mobilities based on an exact analysis of the dielectric function-dependent linearized Poisson's equation for the potential of impurity ions in semiconductors"*, Physical Review B 22 (2), pgs. 982-990, 1980.

- [69] D. Chattopadhyay, *"Electron mobility limited by ionized impurity scattering with nonlinear screening in semiconductors"*, Physical Review B 23 (4), pgs. 1847-1850, 1981.
- [70] J. R. Meyer, F. J. Bartoli, *"Phase-shift calculation of ionized impurity scattering in semiconductors"*, Physical Review B 23 (10), pgs. 5413-5427, 1982.
- [71] D. Chattopadhyay, A. Ghosal, *"Electron scattering in heavily doped compensated polar semiconductors"*, Physical Review B 25 (10), pgs. 6538-6541, 1982.
- [72] D. L. Woolard, H. Tian, M. A. Littlejohn, K. W. Kim, *"Efficient Ohmic Boundary Conditions for the Monte Carlo Simulation of Electron Transport"*, IEEE Trans. on Electron Devices 41 (4), pgs. 601-604, 1994.
- [73] T. González, D. Pardo, *"Physical models of ohmic contact for Monte Carlo device simulation"*, Solid State Electronics 39 (4), pgs. 555-562, 1996.
- [74] E. Starikov, P. Shiktorov, V. Gruzinskis, J. P. Nougier, J. C. Vaissiere, L. Varani, L. Reggiani, *"Electronic noise of submicron n^+nn^+ diodes under near-oscillatory macroscopic behaviors"*, Applied Physics Letters 66(18), pgs. 2361-2363, 1995.
- [75] T. González, D. Pardo, L. Varani, L. Reggiani, *"Monte Carlo analysis of the behavior and spatial origin of electronic noise in GaAs MESFET's"*, IEEE Trans. on Electron Devices 42 (5), pgs. 991-997, 1995.
- [76] E. Starikov, P. Shiktorov, V. Gruzinskis, L. Varani, J. C. Vaissiere, J. P. Nougier, L. Reggiani, *"Monte Carlo calculation of noise and small-signal"*

- impedance spectra in submicrometer GaAs n^+nn^+ diodes*", Journal of Applied Physics 79 (1), pgs. 242-252, 1996.
- [77] T. González, D. Pardo, L. Varani, L. Reggiani, *"A microscopic interpretation of hot-electron noise in Schottky barrier diodes"*, Semiconductor Science and Technology 9, 580-583, 1994.
- [78] B. Carnez, A. Cappy, A. Kaszynski, E. Constant, G. Salmer, *"Modeling of a submicrometer gate field-effect transistor including effects of nonstationary electron dynamics"*, Journal of Applied Physics 51 (1), pgs. 784-790, 1980.
- [79] C. Moglestue, *"A Monte Carlo Particle Study of the Intrinsic Noise Figure in GaAs MESFET's"*, IEEE Trans. on Electron Devices 32 (10), 1985.
- [80] T. González, D. Pardo, *"Spatial analysis of electronic noise in submicron semiconductor structures"*, Applied Physics Letters 63 (1), pgs. 84-86, 1993.
- [81] T. González, D. Pardo, L. Varani, L. Reggiani, *"Monte Carlo analysis of noise spectra in Schottky-barrier diodes"*, Applied Physics Letters 63 (22), pgs. 3040-3042, 1993.
- [82] B. Carnez, A. Cappy, R. Fauquembergue, E. Constant, G. Salmer, *"Noise Modeling in Submicrometer-gate FET's"*, IEEE Trans on Electron Devices 28 (7), 1981.
- [83] V. Gruzinskis, E. Starikov, P. Shiktorov, L. Reggiani, L. Varani, *"Hydrodynamic approach to noise spectra in unipolar semiconductor structures"*, Applied Physics Letters 64 (13), pgs. 1662-1664, 1994.
- [84] J. Mateos, T. González, D. Pardo, P. Tadyszak, F. Danneville, A. Cappy, *"Numerical and experimental analysis of the static characteristics and noise*
-

- in ungated recessed MESFET structures*", Solid State Electronics 39 (11), pgs. 1629-1636, 1996.
- [85] A. Jelenski, A. Grüb, V. Krozer, H. L. Hartnagel, *"New Approach to the Design and Fabrication of THz Schottky Barrier Diodes"*, IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques 41 (4), pgs. 549-558, 1993.
- [86] X. Aymerich-Humet, F. Serra-Mestres y J. Millán, *"An analytical approximation for the Fermi-Dirac integral $F_{3/2}(\eta)$ "*, Solid State Electronics 24 (10), pgs. 981-982, 1981.
- [87] J. S. Blakemore, *"Approximations for Fermi-Dirac integrals, especially the function $F_{1/2}(\eta)$ used to describe electron density in a semiconductor"*, Solid State Electronics 25 (11), pgs. 1067-1076, 1982.
- [88] J. S. Blakemore, *"Semiconducting and other major properties of gallium arsenide"*, Journal of Applied Physics 53 (10), pgs. R123-R179, 1982.
- [89] N. G. Nilsson, Physics of Status Solidi (a), 19 K75, 1973 (ecuación reproducida en [87]).
- [90] B. K. Ridley, *"Quantum Processes in Semiconductors"*, Oxford, Clarendon Press, 1982. (Modelo analítico reproducido en [1]).
- [91] D. Bohm, D. Pines, *"A collective description of electron interactions: III. Coulomb interactions in a degenerate electron gas"*, Physical Review 92 (3), pgs. 609-625, 1953.
- [92] L. Baccheli, C. Jacoboni, *"Electron-electron interactions in Monte Carlo transport calculations"*, Solid State Communications 10, pgs. 71-74, 1972
-

- [93] A. Matulionis, J. Pozela, A. Reklaitis, "*Monte Carlo treatment of electron-electron collisions*", Solid State Communications 16, pgs. 1133-1137, 1975.
- [94] P. Lugli, D. K. Ferry, "*Electron-electron interaction and high field transport in Si*", Applied Physics Letters 46 (6), pgs. 594-596, 1985.
- [95] P. Lugli, D. K. Ferry, "*Investigation of Plasmon-Induced Losses in Quasi-Ballistic Transport*", IEEE Trans. on Electron Device Letters, pgs. 25-28, 1985.
- [96] P. Tadyszak, F. Danneville, A. Cappy, L. Reggiani, L. Varani, L. Rota, "*Monte Carlo calculations of hot carrier noise under degenerate conditions*", Applied Physics Letters 69 (10), pgs. 1450-1452, 1996.
- [97] P. Lugli, tesis doctoral, Universidad estatal de Colorado, 1985 (modelo analítico reproducido en [28])
- [98] M. V. Fischetti, S.E. Laux, "*Monte Carlo Analysis of Electron Transport in Small Semiconductor Devices including Band-Structure and Space Charge Effects*", Physical Review B 38 (14), pgs. 9721-9745, 1988.
- [99] S. E. Laux, M. V. Fischetti, D. J. Frank, "*Monte Carlo analysis of semiconductor devices: The DAMOCLES program*", IBM Journal of Research and Development 34 (4), pgs. 466-494, 1990.
- [100] J. M. Miranda, J. L. Sebastián, "*Monte Carlo Simulation of Electron Velocity in Degenerate GaAs*", IEEE Trans on Electron Device Letters 18 (6), pgs. 258-260, 1997.

- [101] P. Borowik, *"Ensemble Monte Carlo study of the influence of plasmon-phonon coupled modes on hot electron transport in GaAs"*, Journal of Applied Physics 82 (9), 1997.
- [102] B. Varga, *"Coupling of plasmons to polar phonons in degenerate semiconductors"*, Physical Review 137 (6A), pgs. A1896-A1902, 1965.
- [103] M. Kim, A. Das, S. Senturia, *"Electron scattering interaction with coupled plasmon-polar phonon modes in degenerate semiconductors"*, Physical Review B 18 (12), pgs.6890-6899, 1978.
- [104] B. Sanborn, *"Nonequilibrium total-dielectric-function approach to the electron Boltzmann equation for inelastic scattering in doped polar semiconductors"*, Physical Review B 51(20), pgs. 14247-14255, 1995.
- [105] B. Sanborn, *"Electron-electron interactions, coupled plasmon-phonon modes, and mobility in n-type GaAs"*, Physical Review B 51(20), pgs. 14256-14264, 1995.
- [106] A. Moorodian, G. Wright, *"Observation of the interaction of plasmons with longitudinal optical phonons in GaAs"*, Physical Review Letters, 16(22), pgs. 999-1001, 1996.
- [107] A. Mlayah, R. Carles, G. Landa, E. Bedel, A. Muñoz-Yagüe, *"Raman study of longitudinal optical phonon-plasmon coupling and disorder effects in heavily Be-doped GaAs"*, Journal of Applied Physics 69(7), pgs. 4064-4070, 1991.
- [108] V. Vorlizek, I. Gregora, W. Kauschke, J. Menéndez, M. Cardona, *"Raman scattering by the coupled plasmon- LO-phonon modes near the $E_0 + \Delta_0$ gap"*

- of n-type GaAs: Resonance and interference effects*", Physical Review B 42 (9), pgs. 5802-5808, 1990.
- [109] C. L. Petersen, S. A. Lyon, *"Observation of hot-electron energy loss through the emission of phonon-plasmon coupled modes in GaAs"*, Physical Review Letters 65 (6), pgs. 760-763, 1990.
- [110] C. Peschke, *"Interaction of electrons with coupled plasmon phonons in GaAs"*, Journal of Applied Physics 74 (1), pgs. 327-334, 1993.
- [111] P. Lugli, D.Ferry, *"Degeneracy in the Ensemble Monte Carlo Method for High Field Transport in Semiconductors"*, IEEE Trans. on Electron Devices 32 (11), pgs. 24313-2437, 1985.
- [112] M.Fischetti, Comunicación personal (véase apéndice III).
- [113] W. T. Masselink, *"Electron velocity in GaAs: bulk and selectively doped heterostructures"*, Semiconductor Science and Technology 4, pgs. 503-512, 1989.
- [114] W. T. Masselink, N. Braslau, W. Wang, S.Wright, *"Electron velocity and negative differential mobility in AlGaAs/GaAs modulation doped heterostructures"*, Applied Physics Letters 51 (19), 1987.
- [115] T. J. Drummond, R. Fischer, S. L. Su, W. G. Lyons, H. Morkoc, K. Lee, M.S. Shur, *"Characteristics of modulation doped AlGaAs/GaAs field effect transistors: effect of donor electron separation"*, Applied Physics Letters 42 (3), pgs. 262-264, 1983.
- [116] T. J. Drummond, W. Kopp, H. Morkoc, M.Keever, *"Transport in modulation doped structures (AlGaAs/GaAs) and correlation with Monte*
-

- Carlo simulations in GaAs*", Applied Physics Letters 41 (3), pgs. 277-279, 1982.
- [117] T. J. Drummond, R. Fischer, W. Kopp, H. Morkoc, K. Lee, M. S. Shur, *"Bias Dependence and Light Sensitivity of (Al,Ga)As/GaAs MODFET's at 77 K"*, IEEE Trans on Electron Devices 30 (12), pgs 1806-1812, 1983.
- [118] J. Mateos, *"Modelización microscópica del ruido electrónico en estructuras MESFET y HEMT submicrométricas. Análisis numérico y experimental"*, Tesis doctoral, Universidad de Salamanca, Noviembre 1997.
- [119] K. Lee, M. Shur, T. Drummond, H. Morkoc, *"Electron density of the two-dimensional electron gas in modulation-doped layers"*, Journal of Applied Physics 54 (4), pgs. 2093-2096, 1983.
- [120] T. Jakobus, *"MMIC Design Course"*, Fraunhofer Institut, Friburgo, 1994.
- [121] J. M. Miranda, *"One-port microwave noise measurement techniques. Part I: System Setup"*, informe de actividades para el proyecto "CAD and Verification of Novel mm-wave and submm-wave Circuits", ERB FMRX-CT96-0050, Septiembre 1997.
- [122] C. E. Collins, R. D. Pollard, R. E. Miles, R. G. Dildine, *"On the Measurement of SSB Noise Figure Using Side Band Cancellation"*, IEEE Trans. on Instrumentation and Measurement 45 (3), pgs. 721-727, 1996.
- [123] *"Noise Figure Measurements. Principles and Applications"*, Hewlett-Packard application note, Enero 1989.

- [124] A. Caddemi, A. Di Paola, M. Sannino, *"Full Characterization of Microwave Low Noise Packaged HEMT's: Measurements versus Modeling"*, IEEE Trans. on Instrumentation and Measurement 46 (2), pgs. 490-494, 1997.
- [125] *"Noise Measurement Accuracy"*, Hewlett-Packard application note 57-2, Noviembre 1988.
- [126] A. Cappy, *"Noise Modeling and Measurement Techniques"*, IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques 36 (1), pgs. 1-10, 1988.
- [127] J. M. Miranda, *"One-port microwave noise measurement techniques. Part II: Applications"*, informe de actividades para el proyecto "CAD and Verification of Novel mm-wave and submm-wave Circuits", ERB FMRX-CT96-0050, Septiembre 1997.
- [128] J.M. Miranda, A. Grüb, V. Krozer and J.L. Sebastián, *"Accuracy of Non-Oscillating One-port Noise Measurements"*, IEEE Trans. On Instrumentation and Measurement 44 (4), pgs 853-859, 1995.
- [129] J.M. Miranda, J.L. Sebastián, V. Krozer and A. Grüb, *"A Procedure for Accurate Noise Measurements of Non-Oscillating One Port Devices"*, Proceedings del IEEE MTT-S Digest, San Diego CA, pgs. 1065-1067, Junio 1994.
- [130] M. Shaalan, M.Bozzi, J. Weinzierl, J. M. Miranda, A. Vogt, J. Weber, H.L. Hartnagel, G. Conciauro, *"First Design of a 430 GHz Quasioptical HBV Tripler"*, 5th International Workshop on THz Electronics, Grenoble, Sep. 1997.
- [131] J. M. Miranda, A.Vogt, M. Schussler, M. Shaalan, J. L.Sebastian, H. L. Hartnagel, *"Microwave Noise Measurements on $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ HEMT"*

Channels grown by Molecular Beam Epitaxy using As₂ and As₄", enviado para su publicación en Applied Physics Letters.

- [132] D. Gasquet, J.C. Vaissiere and J.P. Nougier, *"New method for wide band measurement of noise temperature of one-port networks at high pulsed bias"*, in Sixth International Conference on noise in Physical Systems, NBS Special Publication, vol. 614, 1981, pp. 305-307
- [133] Jelenski, A. Grüb, V. Krozer, and H.L. Hartnagel, *"New approach to the Design and the Fabrication of THz Schottky Barrier Diodes"*, IEEE Trans. on MTT 41(4), pgs. 549-557, 1993.
- [134] Slawomir Palczewski, Andrzej Jelenski, Andreas Grüb, Hans L. Hartnagel, *"Noise Characterization of Schottky Barrier Diodes for High Frequency Mixing Applications"*, IEEE Microwave and Guided Wave Letters 2 (11), pgs. 442-444, 1992 .
- [135] J.L. Hesler, *"Noise Measurement of Schottky Diodes"*, Master Thesis, Faculty of School of Engineering and Applied Science, University of Virginia, Charlottesville, 1991.
- [136] D. F. Wait, *"Additive and Multiplicative Amplifier Noise"*, IMTC Workshop, Atlanta, pgs. 1-23, 1993.
- [137] D. F. Wait, *"Radiometer Equation for Noise Comparison Radiometers"*, IEEE Trans. on Instrumentation and Measurement 44 (2), pgs. 336-339, 1995.
- [138] D. F. Wait, J. Randa, *"Amplifier Noise Measurements at NIST"*, IEEE Trans. on Instrumentation and Measurement 46 (2), pgs. 482-485, 1997.

- [139] W. Wiatr, M. Schmidt-Szalowski, *"The Multistate Radiometer: a Novel Means for Impedance and Noise Temperature Measurement"*, IEEE Trans. on Instrumentation and Measurement 46 (2), pgs. 486-490, 1997.
- [140] W. Wiatr, *"Multistate Radiometry: Noise de-embedding and un-terminating"*, IEEE Trans. on Instrumentation and Measurement 46 (2), pgs. 503-506, 1997.
- [141] *"HP 8970B Noise Figure Meter Operation"*, Manual de usuario.
- [142] M. Pospieszalski, *"On the Noise Parameters of Isolator and Receiver with Isolator at the Input"*, IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques 34 (4), pgs 451-453, 1986.
- [143] J.M. Miranda, J.L. Sebastián, *"A New Load Selection Technique for Low Noise Amplifier Design"*, Microwave Engineering Europe, pgs. 47-59, 1991.
- [144] J. M. Miranda, J. L. Sebastián, *"Procedimiento para diseñar un amplificador de microondas con especificaciones determinadas de ganancia de transducción pérdidas por reflexión y figura de ruido"*, Patente registrada por la Universidad Complutense, Reg. No. 9200853, 1992.
- [145] A. Boudiaf, C. Dubon-Chevalier, D. Pasquet, *"Verification of On-wafer Noise Parameter Measurements"*, IEEE Trans. on Instrumentation and Measurement, 44 (2), pgs. 332-335, 1995.
- [146] J. L. Sebastián, J. M. Miranda, *"MWAVE: Design, Analysis and Synthesis of Microwave Amplifiers"*, Proceedings de la Conferencia Internacional COMCONEL, pgs. 96-100, El Cairo, 1990.

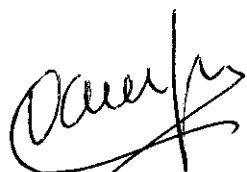
- [147] J. L. Sebastián, J. M. Miranda, "*MWAVE2: A Tool for Microwave Amplifier Design*", Proceedings de la Conferencia Europea de Microondas, pgs. 1009-1011, Madrid, 1993.
- [148] M. Brandt, V. Krozer, M. Schussler, K. H. Bock, H. L. Hartnagel, "*Characterization of reliability of compound semiconductor devices using electrical pulses*", Microelectronics Reliability 36 (11/12), pgs. 1891-1894, 1996.
- [149] R. Lindsted, R. Surty, "*Steady-State Junction Temperatures of Semiconductor Chips*", IEEE Trans. On Electron Devices 19 (1), pgs. 41-44, 1972.
- [150] A. Haji-Sheikh, "*Peak Temperature in High Power Chips*", IEEE Trans. on Electron Devices 37 (4), pgs. 902-907, 1990.
- [151] I. Hirsch, E. Berman, N. Haik, "*Thermal Resistance Evaluation in 3-D Thermal Simulation of MOSFET Transistors*", Solid State Electronics 36 (1), pgs. 106-108, 1993.
- [152] L. Liou, J. Ebel, C. Huang, "*Thermal Effects on the Characteristics of AlGaAs/GaAs Heterojunction Bipolar Transistors Using 2-D Numerical Simulation*", IEEE Trans. On Electron Devices 40 (1), pgs. 35-43, 1993.
- [153] S. M. Sze, "*Physics of Semiconductor Devices*", John Wiley, 2ª edición, 1981.
- [154] H. Nyquist, "*Thermal agitation of electric charge in conductors*", Physical Review, 32, pgs. 110-113, Julio 1928.

- [155] A. Matulionis, R. Raguotis, R. Katilius, "Interparticle collisions and hot-electron velocity fluctuations in GaAs at 80 K", Physical Review B 56 (4), pgs.2052-2057, 1997.

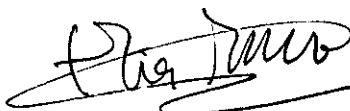
Reunido el Tribunal que suscribi
en el día de la fecha acordó cali-
ficar la presente Tesis Doctoral
con la censura de -

APTO. CUM LAUDE por unanimidad

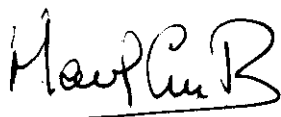
Madrid, 2 de Marzo 1978



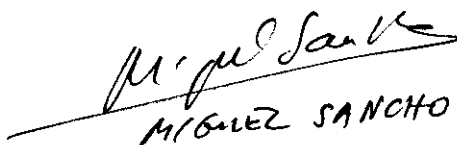
DANIEL PARDO



ELIAS MUNIZ



MANUEL SIERRA



MIGUEL SANCHO

FIRMAN TODOS LOS MIEMBROS DEL